



БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
на **ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ**
за **2023 г.**

Директор на ИОНХ:
/проф. д-р Радостина Стоянова/

януари 2024 г.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ

С изпълнение на специфичните цели и задачи в разработената Стратегия за развитие на ИОНХ за периода 2018-2030 г. и научно-изследователския план на Института за 2021-2024 г., ИОНХ води устойчива научно-изследователска политика. През 2023 г., изследователската работа на ИОНХ продължи по утвърдени научни тематики свързани с енергийната ефективност, оползотворяването на природни ресурси и опазване на околната среда в рамките на активна проектна дейност и финансова подкрепа на ФНИ, ОП-НОИР, МОН - Национална пътна карта (НПК), Национални научни програми (ННП) и от иновативна дейност. През 2023 г. е спечелен **нов Европейски проект по програма M-ERA.NET** с водеща организация ИОНХ-БАН. През 2023 г. ИОНХ проведе заключителен научен форум по проекта **“Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии” (TwinTeam)** по ННП „Европейски научни мрежи“ и отчете успешното изпълнение по изграждане на партньорска изследователска мрежа в областта на химическите науки: химия на материалите за чисти технологии с партньори от Великобритания, Германия и Испания.

През 2023 г. завърши проектния период по изграждането на два центъра финансирани по ОП-НОИР с активното участие на ИОНХ: **Национален център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии“**, координатор ИОНХ-БАН и **Национален център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил)**, съизпълнител ИОНХ. Институтът участва с утвърдени приоритетни тематики: материали и тънки филми за опазване на околната среда; материали за съхранение на чиста енергия. Към центровете се учредяват сдружения с нестопанска цел за тяхното функциониране и осъществяване на дейност за обществена полза.

ИОНХ участва активно в изпълнението на **пет национални научни програми**, целево финансирани от държавата, насочени в полза на обществото: (1) *„Нисковъглеродна енергетика за транспорта и бита”*. ЕПЛЮС; (2) *„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“*; (3) *„Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“*, (4) *„Млади учени и постдокторанти“* и (5) *„Стимулиране на публикационната активност в авторитетни международни научни списания и отворения достъп до научна информация“*.

Научните изследвания през 2023 г. са в изпълнение на **38 проекта** на Института и **17 проекта** с лично участие на учени от ИОНХ. В съответствие с НСРНИ, Политика №.4.5 *„Развитие на фундаментални научни изследвания и насърчаване на върхови научни постижения“* и Специфична цел 5 *„Устойчиво възстановяване на международните позиции на страната по количеството и качеството на международно видимата научна продукция“*, резултатите от научната работа са отразени в **101 научни статии**, публикувани в индексирани издания в международна база данни **SCOPUS** и/или **Web of Science**. Научните изследвания са представени от **67 учени** на **33 научни форума**, от тях 21 международни и 12 национални под формата на **125 доклади** (лекции и постери). Върху научните трудове на учени от ИОНХ през 2023 г. са забелязани ~ **3600 цитирания**, което е показател за високо научно ниво на публикуваните изследвания. През 2023 г. ИОНХ е организатор на международен научен форум „SizeMat4“ и на III-та Национална школа по "Увод в праховата рентгенова дифракция". Благодарение на успеха на „SizeMat4“, в специално издание „Fourth Workshop on Size-Dependent Effect in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat4)“ на реферираното научно списание “Materials” MDPI (IF=3.4, Q2) с отворен достъп са публикувани **20 статии със**

съавтори от ИОНХ, https://www.mdpi.com/journal/materials/special_issues/XI603PZFAQ8. Трима учени от Института бяха гост-редактори на специалното издание.

ИОНХ следва политика за привличането на млади специалисти, поддържане на висока квалификация на учените, осигуряване на кариерно развитие на квалифицирани учени, балансирано разпределение на учените по пол и научни области, осигуряване на съвременна научна инфраструктура и критична маса от учени за решаване на важни за обществото проблеми, в изпълнение на заложените мерки в НСРНИ в РБ 2017-2030. Проведени са седем конкурса за академични длъжности: два - за професор, три – за доцент и два - за главен асистент. Един докторант е защитил дисертационния си труд в по ДП „Теоретична химия“ и един докторант е зачислен по ДП „Неорганична химия“. В ИОНХ работят 14 млади специалисти и учени, 8 от тях по проекти „Вихрен“.

Двама учени на основен трудов договор в ИОНХ – акад. дхн К. Хаджииванов (Физикохимия) и проф. д-р Р. Стоянова (Енергия) са сред първите 2% от милиони учени по света в съответните тематични области в класацията на Станфордския университет за 2023 г. През 2023 г. проф. Р. Стоянова, с номинация от БАН, е приета за член на AcademiaNet The Portal to Excellent Women Academics, което е признание за изключителния ѝ научен принос.

Благодарение на активното проектно и програмно финансиране продължи обновяването на материално–техническата база на Института. Някои новозакупени апаратури за ИОНХ са: прахов рентгенов дифрактометър, рентгено-флуоресцентен спектрометър, който дава възможност за определяне на леки и тежки елементи от натрий до уран в твърди проби; четири мобилни и прецизни контролери за дебит на газов поток на фирмата Bronkhost, Нидерландия; многоканален инфрачервен газов анализатор за непрекъснат анализ на различни съединения в газова среда; високопроизводителни изчислителни ресурси за специализирани изчисления и лицензи; кремпер преса, вакуум сушилня, двуръкавичен сух бокс, високотемпературна тръбна пещ; апаратура за измерване на електрически параметри (ток, напрежение и съпротивление) с вградени източници на ток и напрежение ("Keithley 2450"), система за отлагане на тънки филми Kenosistec KES 500 TC, включваща магнетронно разпрашване и вакуумно-термично отлагане (ЦВП, съвместно с ИЕЕС и ИФТТ) и др.

Устойчивите резултати през 2023 г. утвърждават ИОНХ като водещ национален изследователски и иновационен център по химия на материали и процеси с екологична насоченост в съответствие с принципите на Националната Стратегия за провеждане на качествени фундаментални изследвания и за развитие на специалисти в научната област „3. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.2 „Химически науки“.

1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030

В изпълнение на Специфична цел 9 „*Разширяване на участието на българската научна общност в европейското изследователско пространство и разширяване на международното научно сътрудничество*“ и Специфична цел 1 „*Осигуряване на висока квалификация и ефективно кариерно развитие на учените, основано на високо ниво на научните изследвания на НСРНИ в РБ*“, ИОНХ успешно изгради научни мрежи с чуждестранни научноизследователски организации в рамките на проекта “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam) по ННП „**Европейски научни мрежи**“. Съвместно с три водещи научни организации: Имперски колеж в Лондон (Великобритания), Институт за приложни материали – системи за съхранение на енергия към Технологичния институт в Карлсруе (Германия) и Институт по материалознание към центъра на Испанския съвет за научни изследвания и Университета на гр. Севиля, Испания са проведени обучения, научни форуми и съвместни изследвания. През 2023 г., в рамките на проекта

TwinTeam, ИОНХ организира Четвърти международен семинар „Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat4) и заключителен форум на TwinTeam в Поморие. Във форума участваха 110 български и чуждестранни учени като 5 млади учени получиха награди за най-добро представяне Мероприятието е отразено в мас-медиите, <https://www.bas.bg/?s=SizeMat4>.

През 2023 г. е спечелен нов Европейски проект по програма *M-ERA.NET* с водеща организация ИОНХ-БАН, ръководител проф. Р. Стоянова (КП-06-Д002/3 от 18.5.2023 г.) с партньори от Университет на град Кордоба, Испания, Университет Инону-Малатя, Турция и TÜBİTAK Институт за железопътни транспортни технологии (Тюбитак-Руте), Турция. Проведена е встъпителната среща по проекта на тема „Контрол на електродната повърхност за постигане на свръхвисок обратим капацитет“ с участието на всички партньорски организации.

В изпълнение на една от приоритетните дейности на НСРНИ в РБ, Стълб 3 „Концентриране на научната инфраструктура и изследователския капацитет в значими за икономиката направления и синергията между тях“, а именно приоритетни области на ИСИС като Мехатроника и чисти технологии, ново поколение материали за съхранение на енергия, опазване на околната среда, екологичен мониторинг и оползотворяване на суровини и биоресурси, ИОНХ участва активно в последния етап на изграждане на два научни центъра по ОП-НОИР, два инфраструктурни проекта и пет Национални програми. За някои от програмите е предвидено финансиране в следващата година и ще продължи тяхното функциониране.

➤ **Национален център за върхови постижения** „Мехатроника и чисти технологии“ 2018 – 2023 г. с координатор ИОНХ. Официално е открит научен комплекс, кампус „Гео Милев“, в който учени от 12 научни звена на БАН, вкл. и ИОНХ ще работят в областта на чистите технологии. В кампуса се намира реконструирания блок 29, в който са изградени седем иновативни лаборатории от учени на ИОНХ. Ролята на екипа от ИОНХ е свързана с разработването на каталитични и адсорбционни технологии за опазване на околната среда и електрохимични технологии за съхранение на енергия. Проведена е заключителна конференция по проекта с отчитане на постигнатите резултати по изграждането на три научноизследователски комплекса на Центъра - кампуси „Студентски град“, „Лозенец“ и „Гео Милев“. В рамките на ЦВП са проведени две срещи с представители на бизнеса.

➤ **Национален Център по компетентност** „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил) 2019-2023 г. Като партньор в проекта, през 2023 г. ИОНХ участва с тематика свързана с разработване на нови стъкловидни и стъкло-кристални материали от системите $\text{Li}_2\text{O-V}_2\text{O}_5\text{-MoO}_3\text{-B}_2\text{O}_3$, $\text{Li}_2\text{O-V}_2\text{O}_5\text{-MoO}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\text{Li}_2\text{O-SrO-TiO}_2$ с потенциални свойства за аноден материал на литиево-йонни батерии и суперкондензатори.

➤ **Два научни инфраструктурни проекта** по национална пътна карта (партньор): ИНФРАМАТ (2018-2024) „Разпределена инфраструктура от центрове за производство и изследване на нови материали и техните приложения, както и за консервация, достъп и е-съхранение на артефакти (археологически и фолклорни)“ и СЕВЕ-ЕССЕЛ (2018-2024) „Съхранение на енергия и водородна енергетика“ за обновяване, разширяване и поддържане на научната апаратура в ИОНХ. С помощта на финансовите средства по ИНФРАМАТ се поддържа функционирането на част от апаратите в ИОНХ: напр. профилактика и ремонт на апаратите и заплащане на годишни абонаменти за поддръжка на наличната апаратура. В изпълнение на задачите на ИНФРАМАТ участват 15 опитни изследователи и 4-ма специалисти. В НИ СЕВЕ ИОНХ-БАН участва в Направление 1 „Батерии“. Това позволява да се поддържа оборудването включено в инфраструктурата (закупени са компоненти, консумативи, резервни части, материали и извършени ремонти) и да се

провеждат съответните измервания по изпълнение на проектните дейности. Общият брой на сервизните услуги за 2023 г. е 19.

➤ **Пет национални научни програми към МОН** в съответствие със Специфична цел 6 „Повишаване на количеството и качеството на научните изследвания, свързани с проблеми от национално значение“:

1. „Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта“ ЕПЛЮС, по Компонент 1 “Съхранение и преобразуване на възобновяема енергия” и Компонент 3 "Ефективни методи за улавяне и оползотворяване на CO₂".

2. „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“ Компонент 2 „Растително здраве и безопасност в хранителните системи“, по проблем: Грижи за здравето на хората и РП 2.4.1. *Възобновяеми биологични ресурси в стопанските единици.*

3. „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“. РП 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)“. Програмата е удължена до края на 2024 г.

4. „Млади учени и постдокторанти“– 1 проект на ИОНХ в Модул „Млади учени“ на тема „Теоретично изследване на механизмите на протонен пренос при гуанин“ (д-р Н. Стоянова-Нанкова).

5. „Стимулиране на публикационната активност в авторитетни международни научни списания и отворения достъп до научна информация“ бенефициент БАН. През 2023 г. по тази програма, допълнително финансово стимулиране са получили 52 учени и специалисти от ИОНХ за публикувани статии за 2021 г. в списания с квантил Q1 и Q2.

➤ В ИОНХ се изпълняват два проекта по **ННП „Върхови изследвания и хора за развитие на Европейската наука“ (Вихрен)** към ФНИ, модул „Водещ учен“ за провеждане на върхови научни изследвания и ускоряване на реинтеграцията и кариерното развитие на учени в българските висши училища и научни организации: 1) „Синергизъм между катионни и анионни редокс реакции при материали с колосален интеркалационен капацитет“ (CARiM), ръководител проф. д-р Р. Стоянова, Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и 2) „Advanced Isotopic Labelling for Identification of AB_n Surface Structure“ (Adonis), ръководител акад. К. Хаджииванов, Лаборатория „Реактивност на твърди повърхности“.

➤ Изпълнение на други **20 научни проекта по Фонд „Научни изследвания“ – МОН**, свързани с фундаментални изследвания по приоритетни теми заложи в НСРНИ в РБ и на ИСИС. Два от тези проекта са нови за ИОНХ. В **11** проекта, **ИОНХ е водеща организация**. Учени от ИОНХ са включени с лично участие в проекти на ФНИ (5) и в други проекти (11).

➤ ИОНХ реализира проект «Подкрепа за организиране на международни конференции в страната» целево финансиран от МОН, в изпълнение на т. 3 от Споразумение между БАН и МОН, подписано през 2022-2023 г.

➤ ИОНХ е член на Сдружение с нестопанска цел „Регионален иновационен център за мехатроника и чисти технологии“, гр. Бургас (от 2020 г.).

Националните програми и проекти в ИОНХ осигуриха: поддържане на инфраструктурата с необходимото оборудване, нова апаратура, обучение, развитие и финансови стимули на висококвалифицирани специалисти, осигуряване на висока компетентност и оборудване за подпомагане на високотехнологични производства и бизнеса, партньорство с други сектори като икономика, здраве, земеделие, и партньорство с университети, научни организации, бизнес и училища. С цялостната си научноизследователска дейност, ИОНХ интегрира българската наука в Европейското изследователско пространство, в изпълнение на НСРНИ 2017-2030.

В съответствие с Дейност 1.3. от НСРНИ, активностите в ИОНХ са насочени към развитието на научния потенциал и поддържане на високо научно ниво на изследванията. През 2023 г., е назначен 1 млад специалист, 5-ма млади специалисти и учени работят на щатна позиция и 8 привлечени млади учени изпълняват проекти „Вихрен“. В рамките на компонента 2 от бюджета на ИОНХ се извършва допълнително диференцирано заплащане на учените в ИОНХ, обвързано с постигнати резултати. През 2023 г. служителите в ИОНХ бяха атестирани за три-годишен период 2020-2022 г. Осигуряват се финансови стимули за привличане на повече млади хора към докторантура и постдокторантура. През 2023 г. мобилността на учените е значителна: **201** командировки, от които 57 са в чужбина и 144 – в страната за участие в научни форуми и работни срещи. Двама учени са получили стипендия за научен обмен по програмата Еразъм+ и France Excellence.

В съответствие с Политика 4.6. „*Стимулиране на приложни научни изследвания*“, **приложните изследвания** в ИОНХ са свързани главно с оползотворяване на природни ресурси, в частност морска луга и разработване на технологии за производство на козметика и медицинска козметика в Лабораторията ССПР-Бургас на ИОНХ-БАН. Дейността се осъществява в рамките на Вътрешен договор, свързан с разработване и производство на продукти.

Съгласно хоризонтална дейност 2. *Синхронизирани изменения в нормативните актове, свързани с изпълнението на стратегията*, през 2023 г. в ИОНХ е актуализиран „Правилник за устройството дейността на ИОНХ“ и избран нов Научен съвет на ИОНХ с мандат 2023-2026 г.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

Ползата за обществото от научно-приложните и иновационни дейности на ИОНХ е пряко свързана с разработване на неорганични материали за безопасно съхранение на енергия, за опазване на околната среда, за интелигентни оптични приложения и на биоматериали с приложение в ортопедията и денталната медицина с цел подобряване на здравния и социалния статус на хората. Резултати върху разработените материали и екологичните оценки на природни водни и почвени обекти са публикувани в реномирани списания и са видими за научната общност.

В полза за обществото са разработените технологии за оползотворяване на природни ресурси, в частност морски луги и на продукти за козметика/медицинска козметика по поръчка на бизнеса, които са на пазара. През 2023 г. е внедрен нов продукт. Иновативната дейност е оценена от немски филмов екип като важна за имиджа на Бургас при рекламирането му като туристическа и СПА дестинация. Членовете на Лаборатория ССПР-Бургас са поканени за участие в телевизионния филм „Burgas am Schwarzen Meer“ (<https://www.ndr.de/fernsehen/sendungen/hanseblick/Burgas-am-Schwarzen-Meer-Sonnenstrand-und-weisses-Gold.sendung1395834.html>). ССПР-Бургас участва в организирана от община Бургас Международна конференция с изложение „Burgas Blue Summit and Innovation Expo“, 21-23 July 2023, където представя разработки в областта на натуралната козметика с отношение към развитието на устойчива синя и кръгова икономика и генериране на икономически растеж в Черноморския регион, <https://www.burgas.bg/bg/novini/blue-summit-and-innovation-expo-startira-v-ekspostentar-flora>.

За поредна година, ИОНХ участва в изпълнението на три ННП за решаване на икономически и социални предизвикателства в полза за обществото. По програма „**Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта**“ ЕПЛЮС, изследванията в ИОНХ водят до разработването на ново поколение материали за съхранение на енергия. През декември 2023 г. се проведе заключителната отворена среща по ННП

„Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“ (ЕПЛЮС), на която акад. К. Хаджииванов, координатор на Е+ докладва изпълнението на индикаторите по програмата. Като основен докладчик на срещата се представя и доц. Д. Панайотов от ИОНХ-БАН. По НПП **„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“**, дейността на ИОНХ е насочена към химични анализи и оценка на моментното състояние на повърхностни води и техни седименти от различни райони в България, включващи чисти, битови и индустриално замърсени води, както и води с различна соленост. Провеждат се експериментални изследвания и екологично оценяване на природни водни и почвени обекти чрез прилагането на термодинамични модели. В изпълнение на задачите по НПП **„Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“** учени от ИОНХ са изучили механизма на адсорбция на мед(II) върху биосорбента маточина и резултатите са публикуване в *Bul. Chem. Commun.*, 2023, 55(1), 5-12. DOI: 10.34049/bcc.55.1.NC04.

ИОНХ се включи във форума „Наука за бизнес“ 3, който е съвместна инициатива на БАН и Изпълнителната агенция за насърчаване на малките и средните предприятия с подкрепата на МОН и Министерството на икономиката. ИОНХ участва с щанд на тема „Материали за практиката – Институт по обща и неорганична химия“. С два устни доклада са представени постиженията в ИОНХ, насочени към бизнеса от страната и чужбина с цел установяване на контакти: „Катализатори за обезвреждане на отпадни газове, съдържащи летливи органични съединения, разработени чрез използване на 3D принтиране“, доц. Р. Велинова и „Как бизнесът среща науката в лицето на учените от Институт по обща и неорганична химия“, доц. Л. Александров.

Учен от Лаборатория ССПР е член на Обществен съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро и на Консултативен съвет за Поморийското езеро и със своята компетентност участва активно в мероприятията за опазване и съхраняване на езерата.

Извършват се **сервизни анализи**, консултации и експертизи за нуждите на фирми за подпомагане на икономическото и индустриално развитие на страната. Със спектрометър за рентгенова фотоелектронна спектроскопия са направени анализи по поръчка на няколко фирми. За Сенсата Технолоджис България ЕООД са измерени серия метални и корундови образци; анализирани са особеностите между различните области на контакт, като са изчислени концентрациите на повърхността на изследваните области и е определен химичният състав в дълбочина на пробите чрез ецване с аргонови йони. По поръчка на Техкерамик-М АД е изследван съставът на твърда проба от производствен детайл и е определен химичният състав на повърхността. По поръчка на фирма Мелексис България – ООД са изследвани пинове на интегрални схеми (нови и замърсени). По поръчка на фирма Марс Армор ООД са изследвани две твърди проби от бронезилетки. Установена е разлика в количествения състав и във формата на регистрираните спектри на химичните елементи на повърхността на двете проби, като най-отличителна е по-голямото количество на SiC при едната проба. Редица фирми - МТГ Делфин, Агрополихим, Ронис ЕООД, Тракея ЕООД, Булгартрансгаз, Varite Maning ЕООД, Incolab Services, Reichle & De-Massari и Вал Технолоджи ЕООД са потърсили експертиза от ИОНХ за анализ на материали с прахова рентгенова дифрактометрия. Материали по поръчка на фирмите Ге план ЕООД, Булминт Продъкшън ЕООД и Солво Трейд ООД са изследвани с атомноемисионен спектрометър. За измерване на топлопроводимост са заявили анализи в ИОНХ фирмите Smart Therm IKE (Гърция) и МЕТАКРОЗИС ООД (България).

Обучението на млади учени, постдокторанти, докторанти, студенти и ученици и **подготовката на висококвалифицирани специалисти** в областта на химия на

материалите е дейност с изявен обществен ефект. ИОНХ предоставя своята инфраструктура на студенти и докторанти от други научни организации за извършване на специализирана научна дейност и така допринася за създаването на висококвалифицирани кадри, които са конкурентноспособни на пазара на труда, както в България, така и в чужбина. През 2023 г., ИОНХ има един докторант, защитил успешно дисертационния си труд, трима докторанти са отчислени с право на защита и един докторант е зачислен и е в процес на обучение. В ИОНХ се обучават докторанти и от други институти и университети и през 2023 г. в рамките на съвместни докторантури на ИОНХ с ИЕЕС-БАН и ИЕ-БАН, двама докторанти са защитили успешно дисертационните си трудове. В рамките на програмата „Студентски практики“ 6-ма студенти от ХТМУ са провели обучителни стажове в Лабораториите на ИОНХ. Организирано е еднодневно посещение на студенти от Химикотехнологичен и металургичен университет, гр. София. В Института 13 млади специалисти и учени се обучават и трупат професионален опит. През 2023 г., ИОНХ участва активно в мероприятия насочени към ученическата общност: проведена е ученическа практика за ученици от четири училища. В организиран курс „Получаване на неорганични материали и инструментални методи за тяхното охарактеризиране“ е обучаван (39 часа) един ученик от ЧОУ „St. George International School & Preschool“.

Повиши се информираността на обществото за достиженията на науката и за научните аспекти на актуални проблеми чрез обществени изяви:

- Участие на ИОНХ в Европейска нощ на учените 2023 г. с щанд „Екология-проблеми и решения“; (М. Ганчева, К. Тумбалова, Н. Маринков). На тези форуми, научната дейност на ИОНХ е представена под формата на постери, брошури, демонстрации и експерименти, <https://night.nauka.bg/>
- Интервю на гл. ас. Р. Велинова за новата рубрика „Инициативи в полза на бизнеса“ на списание „Полиграфия“, том 3, 2023 г. за представения проект на тема „Катализатори за обезвреждане на отпадни газове, съдържащи летливи органични съединения, разработени чрез използване на 3D принтиране“ на форум „Наука за бизнес“ 3.
- Представена е изложба “Ретроспекция“ в Националната художествена академия от синтезирани стъкло и стъкло-керамични материали в ИОНХ, <https://www.bta.bg/bg/news/lik/555468-staklen-kaleydoskop-s-unikalni-svoystva-shte-e-chast-ot-ekspozitsiyata-retrospe>.
- Създаден е филм за Национален център по мехатроника и чисти технологии.
- Филм за национален комплекс кампус "Гео Милев"

1.4. Взаимоотношения с други институции

В рамките на проект Европейски научни мрежи TwinTeam, Европейски проект M-ERA.NET, международно сътрудничество - БАН и двустранни проекти на ФНИ, ИОНХ развива международното сътрудничество с водещи научни организации от Англия, Германия, Испания, Турция, Унгария, Китай, Египет.

Учени от ИОНХ си сътрудничат с университети и други институти в България основно в направления енергийни ресурси, енергийна ефективност, нанонауки, нови материали и технологии при изпълнение на:

- два проекта по ОП-НОИР, **Национален център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** с партньори СУ „Климент Охридски“, ТУ-София, ТУ-Варна, ТУ-Габрово и ХТМУ-София и научни групи от 12 института на БАН и **Национален център по компетентност Хитмобил** с партньори от 6 института на БАН и Югозападен Университет

- научни инфраструктурни, национални научни програми и съвместни проекти на ФНИ (22) с партньори: Висши училища (ФХФ-СУ, ХТМУ-София, ФзФ-СУ, Аграрен университет, Пловдив) и Институти на БАН (ИК, ИОХЦФ, ИЕЕС, ИП, ИЕ, ИОМТ, ИМК, ИКИТ, ИФХ, ИЕМПА).
- С Бургаски университет "Проф. д-р Асен Златаров" в рамките на договор за Анализи от външен изпълнител (количествено определяне на химичен състав).
- Учени от ИОНХ с лично участие са включени в проекти на български университети – ХТМУ, МУ-Плевен, МУ-Варна, Факултет по дентална медицина, Медицинска академия.
- Сътрудничества в рамките на съвместни изследвания и публикации в сътрудничество с научни организации от страната, като ИЕЕС-БАН, ИОХЦФ-БАН, ФХФ-СУ, ИФХ-БАН, НАИМ-БАН, ХТМУ-София, ЮЗУ „Неофит Рилски“, Русенски университет – клон Разград и др.

Учени от ИОНХ участват в **експертни органи** в областта на науката и висшето образование: Национален иновационен съвет по ресурсна ефективност и кръгова икономика (експерт-консултант, проф. Д. Рабаджиева); IUPAC Division VI, Chemistry and the Environment (национален представител, проф. Д. Рабаджиева); Национален комитет към Международния съюз по чиста и приложна химия (членове - проф. Д. Рабаджиева и проф. Р. Стоянова), Жури в конкурс за докторска стипендия на Фондация Карол Знание (член на жури, проф. Р. Стоянова).

Участие на учени в **органи на управление на научни учреждения, организации и ВУ**: Международен съюз по кристалография (член в Комисия по прахова дифракция, проф. Д. Ковачева), Национален координационен съвет по нанотехнологии (член, проф. Д. Ковачева), Управителен съвет на Българско кристалографско дружество (зам. председател проф. Д. Ковачева, член доц. П. Цветков), Division of Computational and Theoretical Chemistry of European Chemical Society (национален делегат, проф. И. Георгиева).

Участие на учени в **съвети, комисии и други експертни органи на външни за БАН институции**: Европейска академия, Комитет за наблюдение на ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ (МОН), Национален съвет за наука и иновации (акад. К. Хаджииванов); Национален координационен съвет по нанотехнологии (доц. И. Стамболова); Обществен съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро, Консултативен съвет за Поморийското езеро (доц. С. Тепавичарова).

Рецензии и становища по процедури. Учени от ИОНХ са ценени експерти и през 2023 г. **15** учени са изготвили **27** рецензии и становища по конкурси за научни степени и академични длъжности (8 - за ОНС „доктор“, 10 - за „доцент“, 7 - за „професор“ и 2 – за дипломни работи) към ИОНХ, ИФХ, ИК, ИЕЕС, ИОХЦФ, Геологически институт, ХТМУ, ФХФ-СУ, Skolkovo Institute of Science and Technologies, Русия.

Изготвени са **22** рецензии за проекти на ФНИ и други научни организации в чужбина и **127** анонимни рецензии (от 16 учени) на статии за специализирани списания.

Международни мрежи и организации. ИОНХ участва в Европейска научна мрежа с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam).

Учени от ИОНХ са членове на:

- *организационни и програмни комитети на научен форум*: III-та Национална школа по "Увод в праховата рентгенова дифракция" (проф. Ковачева, доц. П. Цветков); Fourth Workshop on Size-Dependent Effect in Materials for Environmental Protection and Energy Application (доц. Д. Манасиева, доц. Е. Иванова, доц. А. Бъчварова, доц. Г. Атанасова);

14th European Conference on Computational and Theoretical Chemistry (проф. И. Георгиева).

- *международни научни дружества* - Royal Society of Chemistry, Academia Europea, AcademiaNet, American Chemical Society, Международен съюз за чиста и приложна химия;

- *национални научни дружества* - Българско кристалографско дружество, Клуб на българските катализи, Съюз на химиците в България, Съюз на учените в България, Сдружение на олимпийските отбори по природни науки, Българско зеолитно дружество, Българско дружество по стъкло и керамика;

- *Съставителска и редакторска дейност*: за реферираното списание Materials S: Materials Chemistry SI: Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (проф. Р. Стоянова, проф. И. Георгиева, доц. А. Бъчварова).

- *редакционни колегии* - Chemical Engineering Journal (заместник главен редактор), Materials, Academia Environmental Sciences and Sustainability Open Engineering, International Journal of Advances in Chemistry, Recent Patents on Materials Science, Current Smart Materials, Asian Journal of Nanosciences and Materials, Catalysts-MDPI, Science Academique, Frontiers in Chemistry.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

1.5.1. Практически дейности:

➤ Във връзка с изследванията върху устойчиво използване на морските ресурси, в ИОНХ продължава **разработването на иновативни продукти и технологии** на основата на химическите ресурси на Черно море и организирането на малки производства на натурална медицинска козметика, която се предлага в страната и чужбина. През 2023 г. е разработен и нотифициран **1 нов козметичен продукт** по поръчка на бизнеса. Институтът продължава партньорството си с община Бургас и областна управа Бургас като рекламира уникалните солени езера чрез разработените козметични продукти и участва в различни техни инициативи и кръгли маси.

С наличното оборудване в ИОНХ са извършени **сервизни услуги и анализи** за други институти на БАН (ИФХ, ИЕЕС, ИМК и ИИХ) и български университети (ХТМУ-София, ФХФ-СУ, Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас). За нуждите на бизнеса са направени анализи за сертифициране на продукцията, контрол на суровини и технологични процеси за фирмите (XPS) Сенсата технолоджи ООД, Техкерамик-М АД, Мелексис България – ООД, МарсАрмор ООД, (ISP) Ге план ЕООД, Булминт Продъкшън ЕООД, Солво Трейд ООД, (XRD) МТГ Делфин, Агрополихим, Ронис ЕООД, Тракея ЕООД, Булгартрансгаз ЕАД, Varite Maning ЕООД, Incolab Services, Reichle & De-Massari, Вал Технолоджи ЕООД, Камбера Дизайн ЕООД (ДТА), Сика Б-я, Чайка фарма, Калцит АД, МЦ Уроелит, Метакрозис ООД, РУА България ЕООД, Сдружение Тракея, (топлопроводимост) - Smart Therm IKE (Гърция) и МЕТАКРОЗИС ООД.

Практически дейности, свързани с индустрията, енергетиката и околната среда:

➤ Разработване на паладий-съдържащи катализатори, модифицирани с метални оксиди, нанесени върху индустриален носител за работа в реакции на окисление на летливи органични съединения в отпадни газове. Изграждане на многореакторна и пилотна система за проследяване на термичната стабилност и устойчивост на катализатори в присъствие на каталитични отрови.

1.5.2. Проектите, свързани с общонационални и оперативни дейности, в които ИОНХ участва са финансирани от МОН и са както следва:

ИОНХ участва в три оперативни ННП, две инфраструктурни програми, и една ННП „Европейски научни мрежи“ като дейностите и резултатите за 2023 г. се представят в цялостния отчет на програмите към МОН.

Проекти по ННП	Водеща организация	Координатор от страна на ИОНХ
„Европейски научни мрежи“ с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam)	ИОНХ	проф. д-р Радостина Стоянова
„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“	БАН и СУ	проф. д-р Диана Рабаджиева
„Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“	Аграрен университет, Пловдив	доц. д-р Паунка Новачка
„Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“ (ЕПЛЮС)	БАН	проф. д-р Радостина Стоянова

Дейности по ННП „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“. Работен пакет 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)“.

Методът на измерване концентрацията на свободни медни йони с меден йон-селективен електрод (Cu ISE) е приложен за доказване достоверността на използвания термодинамичен подход за изчисляване химичните форми на съществуване на Cu в природни разтвори. Методът е приложен към екстракти на почви замърсени с мед от 4 района в западни Родопи и район до село Челопеч. Тоталната концентрация на Cu варира между 0.002 до 0.213 мг/л, а тази на свободните йони между $1.5 \cdot 10^{-6}$ до $3 \cdot 10^{-12}$ мг/л. Резултатите показват много добро съответствие между експериментално определени и изчислени концентрации на свободни Cu^{2+} йони в широк концентрационен интервал, което е доказателство за приложимостта на предложения комплексен подход за оценка на екологичното състояние на природни води и почви, включващ аналитични методи за анализ, изчисляване коефициенти на замърсяване и изчисляване формите на елементите определящи тяхната бионаличност и токсичност.

В продължение на изследвания върху оценка на водите на реки преминаващи през големи български градове, е сравнено разпределението на формите на главните елементи и нутриенти във водите на река Искър и нейните притоци и река Дунав в района на гр. Силистра. Резултатите показват, че те са в пряка зависимост от хидроложките характеристики на реките. По-малкият обем на водата в реките Лесновска, Блато и Какач в сравнение с река Искър и особено с река Дунав определят по-високи концентрации на разтворен органичен въглерод, респ. органична материя, и по-голям диапазон във вариациите на рН и алкалността, което води до по-висок процент комплексни форми и по-нисък процент на биодостъпните за живите организми свободни йони.

Дейности по ННП „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“, РП 2.4 „Възобновяеми биологични ресурси в стопанските единици“ и научна

задача „Анализ на възможностите и наличните технологии за преработка и рециклиране, както и предлагане на съвременни иновативни технологични решения за приоритетните за страната биоресурси“.

В рамките на програмата са разработени две изобретения с патентоприетел ИОНХ-БАН, автор доц. д-р Иван Узунов. Първото от тях „Природен композитен материал, метод за неговото получаване и използването му за дълбоко адсорбционно десулфиране на течни горива“ е **одобрено през 2023 г. и е действащ патент** (Патент № 67574 В1 / 16.10.2023). Второто изобретение „Процес и реактор за получаване на магнезиев хидрогенкарбонат“ е в процес на експертиза.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2023

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2023 г.

Основните резултати от научно-изследователската дейност на Института следват темите и задачите от научно-изследователския план на ИОНХ 2021-2024 г.

Тема А: Синтез, структура и дизайн на материали за екоенергийни, оптични и биомедицински технологии

Интеркалационни съединения и сложни оксиди като електродни материали за литиево-йонни батерии и пост-литиево-йонни батерии

Тази тема се разработва от учени от Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“

➤ Продължени са изследванията върху натриево-титанови оксиди, получени чрез хидротермален метод под формата на нано-жички, като анодни материали в натриево-йонни и хибридни литиево-натриеви клетки. Установено е, че съхранението на натрий протича предимно по капацитивен механизъм, докато на литий – по смесен капацитивно-дифузионен механизъм, което води до постигане на по-високи специфични капацитети при литиево-натриевите клетки. Натриевите титанати показват много добра циклична стабилност и изключителна стабилност при високи токови натоварвания (т.е. 6 минути на заряд) с обратим капацитет около 140 mAh/g, което ги определя като ефективни анодни материали за хибридни литиево-натриеви йонни батерии.

➤ Изучени са електрохимичните свойства при стайна и висока температура (40 °C) на два вида композити на основата на натриево-железен фосфат-пирофосфат ($\text{Na}_4\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\text{P}_2\text{O}_7$) с въглеродни сажди и редуциран графенов оксид (rGO) като катодни материали в натриево-йонни и хибридни литиево-натриеви йонни полу-клетки. Изследванията в потенциостатичен и галваностатичен режим показват, че композитът на основата на редуциран графенов оксид превъзхожда този с въглеродните сажди, както по отношение на капацитета при разреждане вследствие на принос от капацитивни реакции, така и на цикличната стабилност. В натриеви йонни клетки при стайна температура за този композит е постигнат много добър обратим капацитет от около 95 mAh/g с циклична стабилност 95% след 100 цикъла при скорост 2 часа на заряд, докато при 40 °C капацитетът нараства до 115 mAh/g, но за сметка на понижена циклична стабилност до 88%. Тези резултати показват потенциала на композитите с редуциран графенов оксид като катодни материали в пълни натриево-йонни батерии.

➤ Съвместно с учени от Турция са проведени електрохимични изследвания върху слоести натриево-желязо-манганови оксиди, частично заместени с кобалт и допълнително обработени с MgO като катоди в натриеви батерии. Намерено е, че заместването с кобалт подобрява цикличната стабилност при различни токови

натоварвания, докато магнезиевата добавка стабилизира структурата и повишава капацитета и цикличната стабилност. С подбран катоден материал е проектирана пълна натриево-йонна клетка с анод твърд въглерод, работеща в потенциалната област 2.0 - 4.0 V и постигаща обратим капацитет повече от 40 mAh/g при токово натоварване от 60 mA/g, което е добър резултат от гледна точка на създаване на натриево-йонни батерии.

➤ Успешният подход при дизайна на композити на основата на редуциран графенов оксид и въглеродни сажди е приложен при натриево-желязо-ванадиев фосфато-сулфат ($\text{NaFeVPO}_4(\text{SO}_4)_2$) като катодни материали за натриеви и хибридни литиево-натриеви йонни батерии. Продължават сравнителните електрохимични изследвания на двата типа композити като за първи път процесите на интеркалация на натрий и литий се изследват при висока температура (40 и 60 °C).

➤ Започнати са изследвания върху електрохимичните свойства на натриево-железни фосфати в йонни течности като електролит на основата на $\text{NaFSI}:[\text{Pyr}_{13}]$ ($\text{Pyr}_{13}\text{FSI}$ е N-метил-N-пропилпиридиниев бис-(флуоросулфонил)имид), които позволяват електрохимично циклиране при високи температури до 60 °C и високи работни волтажи до 6V, което е от съществено значение за постигане на по-високи плътности на мощността на натриевите батерии.

➤ С цел създаване на електроден материал с регулирани свойства е изследвано образуването на композити между слоести натриеви преходнометални оксиди и натриеви фосфати-пирофосфати като електроди. Показано е, че при температури над стайната, стабилността на капацитета на композитните електроди се определя от фосфатния компонент, докато при стайна температура – от слоестия оксид.

➤ В търсене на ефективни електродни материали е показано, че слоестите натриево-манганови оксиди заместени с магнезий имат огромен специфичен капацитет благодарение на активиране на редокс реакцията на решетъчния кислород. Чрез вариране на начина на подреждане на слоевете и морфологията на оксидите са придобити нови знания как да се контролира кислородната редокс реакция при използването на заместените с магнезий слоести оксиди като електродни материали за натриево-йонни батерии.

➤ Съвместно с колеги от СУ се разработва батерия, използваща органични съединения като електроди. Предложена е нова концепция за проектиране на органосерни съединения с регулирани редокс свойства и ограничена разтворимост. Изследвани са пери-дисулфо-заместени 1,8-нафталимидни производни, в които се варира дължината на алкиловата верига и халогенните заместители (Cl или Br) на 3 и 6 позиции. Измерванията са направени в моделни триелектродни клетки тип Swagelok срещу Li като отрицателен и сравнителен електрод в присъствие на електролити 1M LiTFSI-Pyr13FSI (1:9) и 1M LP30. Установено е, че в присъствие на електролит на основата на йонни течности, новите пери-дителио-1,8-нафталимиди участват в *n*- и *p*-тип редокс реакции при около 2.0 V и над 4.0 V спрямо Li/Li⁺, съответно. Редокс потенциалите са чувствителни към Cl или Br заместители в структурата на молекулата, докато дължината на алкиловата верига определя кинетиката на редокс реакциите. Хлоро-заместеното съединение с по-къса алкилова верига показва най-добра кинетика за редокс реакции, както с ниски, така и с високи потенциали. Поради голямата разлика в потенциалите на редокс реакциите, органосерните съединения имат възможна приложимост като електроди в симетрични йонни клетки и откриват нова перспектива в развитието на пълни органични йонни батерии.

➤ Целево са получени твърди въглероди от био-отпадъчни продукти (утайка от кафе и черупки от орехи). Твърдите въглероди са охарактеризирани структурно,

текстурно, морфологично и електрохимично като отрицателни електродни материали за натриево йонни батерии. Проследено е влиянието на типа на пре-пиролизната обработка на изходните суровини, и на вида и наличието на пепел върху специфичния капацитет и стабилност при многократно циклиране и върху способността им за работа при високи токови натоварвания.

➤ Разработена е комплексна методология за изследване поведението на неводни електролитни разтвори преди масивното им деградиране посредством *in-situ* EPR спектроскопия. Методологията е допълнена с електрохимични измервания в симетрични и асиметрични клетки с цел валидиране резултатите от ЕПР клетката и елиминиране ефекта на вида на електродите. Установено е, че преди процеса на масивно разлагане на електролита се образуват дълго-живущи анион радикали на основата на етилен карбонат. Наличието на тези радикали дава нови насоки за обяснение на сложните процеси, протичащи при стареене на електродните материали в реални литиево-йонни батерии.

➤ В сътрудничество с изследователската група на д-р Jakub Holovsky (Чехия), е проведено електрохимично изследване на тънки филми от молибденови оксиди, получени по метода на лазерно отлагане. Електрохимичното изследване включва изучаване на способността на филмите да взаимодействат обратимо с литиеви и натриеви йони. Показано е, че молибденово-оксидните филми взаимодействат с литиевите йони по интеркалационен механизъм, докато реакцията с натриевите йони протича по капацитивен механизъм.

➤ Съвместно с колегите от Лаборатория Високотемпературни оксидни материали е проведено детайлно изследване върху способността на NaVMoO_6 да взаимодейства обратимо с литиеви и натриеви йони. Получените резултати показват предимствата на механохимично получените образци като електродни материали пред тези, синтезирани по класическите твърдофазни реакции, както за литиеви, така и за натриево-йонни клетки.

➤ Заедно с колеги от Университет в гр. Кодоба (Испания) е подготвен литературен обзор върху новите тенденции за използване на неслоести манганови съединения като електродни материали за натриево-йонни батерии. Обзорът включва собствени и чужди изследвания.

Хибридни материали за суперкондензаторни системи

Гв тази тема работят учени от Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“

➤ За да станат реални хибридните устройства между батерия и суперкондензатор (т.е. суперкапатор) е необходимо да се намерят електродни материали, които показват смесен механизъм за електрохимично съхранение на енергия. В рамките на двустранно сътрудничество с Китай, е показано, че литиево-мангановите сулфати могат да се използват като суперкапаторни материали при температури между 40 и 60 °C. Литиево-мангановите сулфати са способни да съхраняват обратимо Li^+ чрез хибриден механизъм, който зависи от вида на използвания електролит и температурата на функциониране на електрохимичната клетка. По време на електрохимичната реакция се осъществява преобразуване на моноклинната сулфатна сол в орторомбична, която е най-вероятно отговорна за подобрените свойства за съхранение на енергия. В резултат, орторомбичната сол, $\text{Li}_2\text{Mn}(\text{SO}_4)_2$, показва отлични електрохимични свойства при повишени температури: при 60 °C плътността на енергия достига 280 Wh/kg при плътност на мощността от 11 000 W/kg.

Нанокмпозитни материали за акумулиране на водород

Темата се изпълнява от учени от Лаборатория „Кристалохимия на композитни материали“, Интерметалиди и интеркалационни материали

- В рамките на проект по ФНИ са сравнени свойствата на хидриди на основата на MgH_2 с добавки от V или Ni, и активен въглен, получен от различни селскостопански отпадъчни продукти (от производство на полиетилен (POW), орехови черупки (CAN) и прасковени костилки (CPS)). Структурните и микроструктурните свойства на получените образци са характеризирани с XRD и TEM. Въз основа на сравнителния анализ е установено, че видът на въглеродната добавка има по-слабо изразен ефект върху кинетиката на хидриране/дехидриране и абсорбционния капацитет в сравнение с вида на добавения метал. При добавянето на никел в процеса на хидриране се получава тройния хидрид Mg_2NiH_4 , който допринася за катализиране на хидрирането на магнезия и съответно подобрява свойствата му на съхранение на водород.
- Получена е сплав Mg-Ni-Al-Ti-V след 100 ч. смилане в планетарна мелница под аргон, като тя е от типа MgNi, където Ni е заместен частично от Al, Ti и V. Сплавта се характеризира с много добра кинетика на хидриране и достига капацитет от 2.3 мас. % H_2 при 300°C и 1 Мра (за 3 мин. достигнатият капацитет е 1.6 мас. %). На базата на ex-situ рентгеноструктурен фазов анализ и TEM, е установено формирането на интерметалид Mg_2Ni . Тези изследвания са част от работната програма по двустранен проект.

Интелигентни оптични системи на основата на стъкла, керамики и органометални съединения

Учени от Лаборатории „Високотемпературни оксидни системи“, Кристалохимия на композитни материали“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“ са ангажирани в изпълнението на тази задача.

- Заедно с колеги от ИЕ-БАН са проведени изследвания върху процесите на аблация и модификация на керамики от AlN и Si_3N_4 чрез пикосекунден лазер. Чрез XPS и XRD са охарактеризирани изследваните керамики преди и след лазерната обработка при различни условия (вакуум и въздух). Установено е, че лазерното третиране води до различни микро- и наноструктури на повърхността на материала. Получени са нови данни за пикосекундното взаимодействие на лазерното вещество, които могат да се използват при структуриране на повърхността на керамиката и при проектиране на сложни композитни материали.
- Изследван е ефектът от добавянето на Nb_2O_5 (до 5 mol%) върху структурата и луминесцентните свойства на ZnO- B_2O_3 стъкло, дотирано с 0,5 mol% Eu_2O_3 . Получени са обемни, прозрачни стъкла с бледо жълто оцветяване. Чрез ИЧ спектроскопия е установено, че ниобиевите йони се вграждат в структурата на основното цинково боратно стъкло като NbO_4 тетраедри и NbO_6 октаедри, свързани помежду си чрез общи ръбове и върхове във вериги, и в 3D клъстери. Синтезираните стъкла се характеризират с висока температура на застъкляване - над 500°C и с много добра термична стабилност. Добавянето на Nb_2O_5 води до образуване на по-здрава и добре омрежена аморфна структура. Наблюдаваната по-висока емисия на Eu^{3+} йоните в цинково-боратните стъкла, съдържащи Nb_2O_5 в сравнение с двукомпонентното цинково-боратно

стъкло доказва, че Nb_2O_5 е подходящ компонент за модифициране на структурата на основното стъкло и подобрява интензитета на излъчване на активния йон. Установено е, че тези състави стъкла са подходящи обекти за разработване на нови стъклени матрици с потенциално оптично приложение.

➤ Изследвано е влиянието на различни добавки (Nd_2O_3 и ZnO) върху склонността към ликвация и кристализация на моделни боро-силикатни стъкла съдържащи MoO_3 , използвани за имобилизиране на радиоактивни отпадъци от електроцентрали. Добавянето на Nd_2O_3 (до 10 мас. %) води до получаването на стъкла, съдържащи кристална фаза $\text{Na}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MoO}_4$, която се характеризира с много по-висока устойчивост на разтваряне във вода в сравнение с т.н. „жълта фаза“ (Na_2MoO_4 и CaMoO_4). От друга страна, добавянето на ZnO (от 5 до 10 мас. %) води до получаване на хомогенни стъкла и възпрепятства ликвационни и последващи кристализационни процеси.

➤ В системата $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3$, са получени стъкла дотирани с 0.5, 1 и 2 at% Dy^{3+} . След накаляване при 580°C и 630°C в продължение на 2, 5 и 24 часа в стъклокерамиката кристаллизират три различни фази - NaAlSiO_4 със структури на нефелин и Low-Carnegeite, $\text{Na}_3(\text{BO}_2)_3$, и малки количества от неизвестна фаза със структура на BaV_2O_4 . Определени са количествата на кристализиращите фази, аморфността и размерът на частиците. Установено е, че при кратко време на третиране кристаллизират едновременно нефелин и Low-Carnegeite. При по-продължително третиране Low-Carnegeite се превръща в нефелин. Количеството на боратната фаза е около 30%. Спектрите на възбуждане и емисия на стъклокерамиката съдържат характеристични за Dy^{3+} пикове при 483 nm и 575 nm. Нюансът на цвета може да бъде контролиран чрез концентрацията на диспросия и режимът на термично третиране. Измерванията на времето на живот показват, че Dy^{3+} в стъклокерамиките се намира в три различни обкръжения.

➤ Успешно е осъществен директен механохимичен синтез на BaMoO_4 , прилагайки две скорости на активиране (500 и 850 оборота). Скоростта на активиране влияе върху времето на синтез, симетрията на основните структурните единици и оптичните свойства. Получените образци се характеризират със синя и зелена емисия при стайна температура.

➤ Понижена е температурата на твърдофазан синтез с 100°C на кубичен SrTiO_3 след механохимично активиране. Полученият образец е изследван като аноден материал за литиево-йонни батерии.

➤ Установено е влиянието на състава на изходната смес при механохимично активиран твърдофазен синтез на $\text{Li}_2\text{SrTi}_6\text{O}_{14}$ – фаза с потенциално приложение като анод в литиево-йонни батерии. Механохимичното третиране на смеси от $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}-\text{SrCO}_3-\text{TiO}_2$ и $\text{Li}_2\text{CO}_3-\text{SrCO}_3-\text{TiO}_2$ води до аморфизиране на Li-съдържащи прекурсори ($\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ и Li_2CO_3) и SrCO_3 , като най-устойчив на механохимично въздействие е TiO_2 . Термичното третиране при 900°C за 10 ч. на механично активирания образец от $\text{Li}_2\text{CO}_3-\text{SrCO}_3-\text{TiO}_2$ води до получаване на чиста фаза от $\text{Li}_2\text{SrTi}_6\text{O}_{14}$, докато термичното третиране на механично активирания образец от $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}-\text{SrCO}_3-\text{TiO}_2$ не доведе до получаване на чиста фаза от $\text{Li}_2\text{SrTi}_6\text{O}_{14}$.

➤ Изследвани са магнитооптични (МО) ефекти на Кер за ZnO и ZnO:Ni-легирани наноламинатни структури получени чрез атомно слойно отлагане (ALD). Химическият състав и съответните структурни и морфологични свойства са изследвани с помощта на XRD и XPS и сравнени за двете наноструктури.

➤ Проведени са структурни анализи на усъвършенствани многофункционални йонопроводими полимерни нанокомпозити с потенциално приложение в бъдещи електрохимични и интегрирани интелигентни електрохромни устройства, батерии и суперкондензатори, електрохимични сензори, нано- и „оксидна“ електроника и други съвременни приложения.

Нанокомпозитни материали с биомедицинско приложение

Темата се разработва от учени от Лаботориите „Солеви системи и природни ресурси“, „Кристалохимия на композитни материали“, „Материали и процеси за опазване на околната среда“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“.

➤ Стъклокерамични материали от система $(23.1-z)\text{Na}_2\text{O}/17.1\text{BaO}/6\text{SrO}/23\text{TiO}_2/17.4\text{SiO}_2/7.6\text{B}_2\text{O}_3/5.8\text{Fe}_2\text{O}_3/z\text{Al}_2\text{O}_3$, $z = 0$ и $3 \text{ mol } \%$ са изследвани посредством XPS. Доказано е, че в двата състава, кристални фази, съдържащи Ba^{2+} и Sr^{2+} йони присъстват под формата на перовскитна структура. Деконволюцията на O1s пика за двата състава показва, че добавянето на алуминиев оксид към състава предизвиква образуване на връзки от типа Si-O-Si, които водят до стабилизиране на стъклената мрежа. Изследванията са част от работата по проект КП-06-Н48/4, финансиран от ФНИ.

➤ Съвместно с ИЕ-БАН са проведени изследвания по отлагане на покрития на диамантено-подобен въглерод (DLC) върху подложки от неръждаема стомана в температурен интервал $300^\circ\text{C} - 500^\circ\text{C}$ чрез парогазово отлагане с електронен лъч (electron beam physical vapor deposition). XPS измерванията показват, че DLC филмите съдържат голямо количество C-C връзки в sp^3 хибридизация. Намерено е, че при повишаване на температурата, грапавостта на повърхността на получените филми и коефициентът на триене намаляват. Устойчивостта на корозия на пробите е изследвана с помощта на 3 електрохимични техники: потенциал на отворена верига (ОСР), циклична волтаметрия (поляризационни измервания) и неразрушителна електрохимична импедансна спектроскопия (EIS). Установено е, че най-устойчивата на корозия проба е DLC филм, получен при 500°C .

➤ Изучени са протичащите в разтвора процеси при биомиметичен синтез на хибридни материали от калциеви фосфати и полициктерйонни полимери и са изяснени факторите за утаяване на различни калциево-фосфатни фази. Установено е, че когато не се поддържа постоянно рН по време на синтезата, начинът на смесване на изходните разтвори и променящото се рН влияят върху състава на предзародишните кълстери отговорни за вида на утаените калциеви фосфати. Когато разтворът на Са се добавя към разтвора на Р, HPO_4^{2-} йони доминират и $\text{Ca}(\text{HPO}_4)_3^{4-}$ кълстери преобладават в разтвора. Когато разтворът на Р се добавя към разтвора на Са, Ca^{2+} йони преобладават. рН е 4.5 – 6.3 в зависимост от използвания полимер. Доминиращите предзародишни кълстери са CaHPO_4^0 , основните структурни единици на киселите калциеви фосфати и дикалциев фосфат дихидрат се образува като основна фаза. Когато рН се поддържа постоянно 8.0

– 8.2, то е отговорният фактор за създаване на хомогенни условия за формиране на CaPO_4^- клъстери и получаване на слабокристален хидроксиапатит.

➤ Получени са два нови материала с реминерализационна активност – слабокристален хидроксиапатит-поликарбоксибетаин (PCB) и слабокристален хидроксиапатит-полисулфо бетаин (PSB). Чрез ИЧ и Раман спектроскопия е доказано по-силното електростатично взаимодействие на хидроксиапатита с PCB, отколкото с PSB. Въпреки това, при контакт с изкуствена слюнка, свободните Ca^{2+} йони в разтвора са с по-висока концентрация при PCB, в резултат на разтваряне на слабокристалния хидроксиапатит поради образуваият се по-плътен полимерен хидрогел на повърхността на материала. Последният възпрепятства проникването на отделените Ca^{2+} йони през него, формирането на комплекси, както с полимерните цвистерйони, така и с другите компоненти на слюнката и така способства по-добрата реминерализационна активност на материала.

➤ Чрез микро компютърна томография и SEM анализи на зъбни образци, реминерализирани с получени хибридни материали е доказан по-високият реминерализационен потенциал на хибриден материал от аморфен калциев фосфат и PCB в сравнение с такъв съдържащ PSB. При условията на проведения експеримент, при използването на материал с PCB в изкуствено създадена лезия се създава новообразуван калциево-фосфатен слой, подобен на зъбния емайл и се регистрира увеличаване на плътността ѝ. Такива ефекти при материал съдържащ PSB не са регистрирани. Експериментите по де- и ре-минерализация на зъбните образци са проведени от колеги от Стоматологичния факултет на МУ-София.

➤ Чрез механохимично активиране и последващо бързо нагряване и охлаждане са получени наноразмерни керамични прахове на основата на тетракалциев фосфат (TTCP), приложими като прекурсори за дентални цименти. Доказано е, че при бързо нагряване и охлаждане на механохимично активирана еквимоларна смес от CaHPO_4 и $\text{Ca}(\text{OH})_2$, количеството TTCP нараства до 65% в сравнение с 10% получени при стъпаловидно нагряване на същата смес. Наблюдаваните различия между двата режима на нагряване са обяснени с невъзможността за пълно протичане на вторични процеси на разлагане и на взаимодействие на отделящите се газове с минералните фази и между самите минерални фази при бързото нагряване и охлаждане, които потискат образуването на TTCP. От приготвените по този начин керамични прахове на базата на TTCP и съдържащи α -TCT и хидроксиапатит са получени самовтвърдяващи се калциево-фосфатни цименти, показващи по-добри характеристики от цимента на базата на еднофазен TTCP.

➤ Получени са керамични таблетки от Mg (8,44 mol %) и Zn (2,63 mol %) заместен β -трикалциев фосфат (TCP) чрез биомиметично утаяване на аморфен калциев фосфат в среда от симулирана телесна течност, обогатена с Mg^{2+} и Zn^{2+} йони и в присъствието на валин като органична добавка. Последвано е таблетирание и стъпаловидно калциниране до 1000 °C. Повърхността на таблетките е модифицирана с фемтосекунден лазер при промяна на параметрите на лазера. Установено е, че лазерната модификация не променя вида и кристалността на фазата на керамичния материал. В същото време

получената фино структурирана набраздена нова повърхност влияе на морфологията на клетките на *Escherichia coli*, намалява тяхната жизнеспособност и така се повишава антибактериалната активност на материала. Експериментите, свързани с лазерната модификация и антибактериалните свойства са проведени съответно в ИЕ-БАН и ИМБ-БАН.

➤ Получени са синтетични керамични подложки под формата на таблетки от монофазен хидроксиапатит и двуфазни от хидроксиапатит и β -трикалциев фосфат. Изследвано е поведението им при симулиране на де- и реминерализационни процеси, за да се оцени стабилността им в условия сходни с тази в устната кухина. Двуфазната керамика е по-малко стабилна и по-лесно се деминерализира, докато при обратния процес на реминерализация няма разлика в поведението на двата керамични образца. Освен с по-високата разтворимост на β -трикалциевия фосфат, по-лесната деминерализация на двуфазните образци се дължи и на по-малката геометрична плътност, респективно компактност на получените таблетки.

➤ Синтез, структура и термични характеристики на манган-глицин-нитратни комплекси. Изследвани са процесите на комплексообразуване, доминиране и стабилност на комплексите в разтвори на системата $\text{Gly} - \text{Mn}(\text{NO}_3)_2 - \text{H}_2\text{O}$ при 10°C и е предсказана кристализацията на две глицинови съединения: $2\text{Gly} \cdot \text{Mn}(\text{NO}_3)_2$ с широко кристализационно поле и $6\text{Gly} \cdot 2\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ с тясно кристализационно поле. Спектралните (ФТ-ИЧ и Раман) изследвания на получените съединения доказват, че структурите им са от верижен тип, като структурата на $2\text{Gly} \cdot \text{Mn}(\text{NO}_3)_2$ (триклинна система, P-1 пр. гр.) е изградена от електронеутрални смесени октаедри $[\text{MnO}_{4(4/2\text{Gly})}\text{O}_{2(2\text{NO}_3)}]^0$, докато тази на $6\text{Gly} \cdot 2\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (моноклинна система, пр. гр. P21/n) - от положително заредени глицинови октаедри $[\text{MnO}_{6(6/2\text{Gly})}]^{2+}$ и свободни NO_3^- йони и H_2O молекули. И в двете структури глициновият цвителион действа като бидентатен лиганд.

➤ Съвместно с колеги от ФФ на МУ-София са разработени нови системи за дермално доставяне на кверцетин, базирани върху два вида мезопорести силициеви частици, включени в олеогел. Установена е по-добра водоразтворимост на кверцетина след включването му в силициевите материали и постигане на контролирано продължително освобождаване на лекарството след включването на частиците в олеогела.

➤ Съвместно с колеги от ФХФ-СУ е изследвано фотохимичното разлагане на тетрациклинов хидрохлорид във водни разтвори в присъствие на механохимично синтезирани хомогенни лантан-цериево железни перовскити. Установено е, че реакцията се управлява от съдържанието на Ce^{4+} в твърдите разтвори, а наличието на пероксодисулфат повишава ефективността на реакцията на разлагане при облъчване с видима светлина.

➤ Доксорубицинът е хидрофилен химиотерапевтик, чието приложение се затруднява от неговата висока кардиотоксичност. В опит за намаляване на този ефект са разработени различни хибридни наносистеми като носители за доставка на лекарството и в комбинация с кардиопротективни агенти. Установено е, че хидрогел-функционализираните мезопорести силициеви наночастици имат различно поведение в

зависимост от температурата и рН на средата в мястото на доставяне на лекарство в тумора. Предложена е успешна процедура за ефективно двойно натоварване на хидрофилно (Доксорубин) и хидрофобно (Кверцитин) лекарство. Карбоксимодифицираните хибридни наносистеми показват намалена *in vitro* кардиотоксичност на доксорубин и могат да се разглеждат като потенциална химиотерапевтична формулировка. Подобен положителен ефект на по-висока кардиозащита се наблюдава при едновременно капсулиране на Доксорубин с друг кардиопредпазващ агент (Ресвератрол) в мицели на Pluronic. Освен намаление на кардиотоксичността, тази мицеларна система демонстрира увеличен цитотоксичен ефект спрямо лимфомни клетки.

Перовскитни материали за преобразуване на енергия

Тази тема се разработва от учени от Лабораториите „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Съвместно с учени от Германия и Словения, е разработен нов многофункционален органичен буферен материал на базата на тиофен с хетероциклична структура, който е използван като пасиватор на дефекти и като буфер в тънкослойни и обемни перовскитни фотоволтаични устройства. Резултатите от проведените тестове демонстрират, че този органичен буфер е подходящ кандидат за създаване на 1D перовскитоиди. Времето за флуоресценция и в двата варианта на използване на буфера стават по-дълги и допринасят за по-висока производителност на фотоволтаичното устройство, което се съчетава с по-висока ефективност, термична и екологична стабилност в сравнение със стандартните перовскитови органични фотоволтаици. Изследването е принос към разработване на иновативни соларни клетки.

➤ По проект "Иновативни презареждаеми без въглеродни въздух-цинк клетки" са изследвани два материала с перовскитен тип структура - LSM ($\text{La}_{0.80}\text{Sr}_{0.20}\text{MnO}_{3-\delta}$) и LSCF ($\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$). Тези съединения са подходящи за безвъглероден газодифузионен електрод (GDEs) за презареждаеми цинк-въздух батерии. Пригответените електроди са охарактеризирани структурно и електрохимично преди и след работа.

➤ Съместно с изследователската група на д-р Петров от Имперския колеж (Лондон) са продължени изследванията върху термоелектричните свойства на тънки филми от калциево-кобалтови слоеви оксиди и кобалтово-базирани перовскити. Показано е, че термоелектричните свойства на филмите се отличават значително от тези на обемните и аналозите им и се определят от различните спинови състояния на кобалта в слоевите и перовскитните оксиди.

➤ Предложена е нова концепция за регулиране на термоелектричните свойства на материалите при стайна температура. Тя се състои в образуване на хибридни композити между материали на базата на въглерод и оксиди. Като въглероди са подбрани два вида графенови материали, предоставени от фирмата Graphit Kropfmühl GmbH (Германия): N-съдържащ редуциран графенов оксид (NrGO) и експандиран графит (ExGr). Като оксиди са избрани два перспективни термоелектрически материала: *p*-тип $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ и *n*-тип $\text{Zn}_{0.995}\text{Al}_{0.005}\text{O}$. Показано е, че начинът на опаковане

на частиците на оксидите от въглеродните добавки, както и присъщите свойства на графено-подобните материали регулират термоелектричните свойства на композитите. Установено е, че 2 тегл.% от графен-подобните добавки водят до повишаване на термоелектричната активност на $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$, докато при $\text{Zn}_{0.995}\text{Al}_{0.005}\text{O}$ количеството на добавките варира между 5 и 20 тегл.%.

Тема Б: Материали и процеси за опазване на околната среда и борба с климатичните промени

Каталитични системи, кинетика и механизъм на каталитични реакции за почистване на емисии от отпадни газове, летливи органични вещества и азотни оксиди

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите "Материали и процеси за опазване на околната среда", „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Изучена е каталитичната способност на състави на CoRe, K-CoRe, CoReMo и K-CoReMo в WGS реакцията и е изяснен ефектът на CO/Ar реакционната смес, използвана при предварителна активиращо-редукционна обработка за образуване на активен катализатор. Анализирани са фрагментите Oxo-K-Co-Re(Mo), образувани в синтезираните проби и тяхната редуцируемост посредством няколко физикохимични метода като физисорбция на N_2 , PXRD, UV-Vis, DRS и H_2 -TPR.

➤ По проект "Хитмобил" детайлно е охарактеризиран композитен материал от итриево дотиран бариев цеарат покрит с редуциран никел - Ni/BCY15. Този тип композитни материали са изключително перспективни като аноди в pSOF горивни клетки. Редукцията на металния никел е извършена с хидразин във вода и етиленгликол (за сравнение), Ni/BCY15-W и Ni/BCY15-EG. Установено е, че композитът, редуциран с хидразин в етиленгликол има по-висока стабилност и каталитична активност.

➤ Създаден е комплексен катализатор с висока активност и дългосрочна стабилност за окисляване на толуен, пропен, пропан, бутан, хексан, диметил етер и CO при температури 100–350°C. Катализаторът е с иновативен дизайн тип „яйчена черупка“, при който активната фаза, представляваща композит от редуциран графенов оксид и Pd-наночастици, е нанесена върху керамичен носител посредством алуминиев хидрогел. Максимална каталитична активност е постигната при съотношение Pd/PdO =1. Съществено предимство на новия комплексен катализатор е устойчивостта му по отношение на присъствие на водни пари и серен диоксид в газовата смес, както и възможността за пълната му регенерация. Създаден е двуизмерен модел на каталитичен реактор за прогнозиране на условията за 99.0 % превръщане на толуен при почистване на съдържащи го отпадъчни газове и температура на входа под 190°C при полуадиабатни условия.

➤ Получени са нови данни за влиянието на TiO_2 върху Pd/La₂O₃-CeO₂-Al₂O₃ система за каталитично окисление на метан в присъствието на H_2O и SO_2 . Установено е, че след термично стареене се наблюдава: (i) агломерация на паладиевите клъстери; (ii) трансформация на част от TiO_2 от анатаз в по-големи частици рutil; и (iii) увеличаване на съотношението PdO/Pd над неговия оптимум. Демонстрирано е, че добавката на Ti в системата води до по-висока устойчивост в присъствие на SO_2 . За

оценка на възможното практическо приложение на получения материал, е тествана проба от него, която е нанесена върху валцована неръждаема стомана, съдържаща алуминий (Aluchrom VDM®). Двумерен хетерогенен модел на монолитен канал е използван за симулиране на окислението на метан в монолитен реактор в индустриален мащаб.

➤ Проведени са каталитични тестове върху реакция на пълно окисление на пропан и *n*-хексан на Co-ZSM-5 катализатори с различно съотношение Si/Al (23, 40, 50). Катализаторът е получен след проведена обработка с буферен разтвор на флуороводородна киселина и амониев флуорид, използвани за постигане на вторична мезопорьозност. Установено е, че по-фината дисперсия на метални частици върху йерархичните зеолити и наличието на вторична мезопорьозност играят положителна роля за повишаване на каталитичната активност, като създадената допълнителна порьозност подобрява достъпа на реагентите до активните центрове.

➤ Приложен е Pluronic-модифициран метод на съвместно утаяване за получаване на CeO₂-Mn₂O₃ катализатор. Тестовите за фотокаталитично обезцветяване на моделното багрило малахитово зелено под UV светлина и разлагане на озон, показват високи степени на конверсия на озон и на обезцветяване на багрилото.

➤ Получени са оксидни частици TiO₂ чрез “зелен синтез” с участие на различни количества екстракт от *Mentha spicata* с последваща хидротермална и термична обработка. Получени са и двуслойни системи, върху нисковъглеродна стомана, като подслои Zn-Co или Zn-Ni и хидрофобен ZrO₂ зол-гел слой. Установено е, че поляризационното съпротивление на системите при 25-дневния тестов период е по-високо от това на обикновения цинк. Този резултат разкрива потенциала на системите за индустриални приложения за нанасяне на слоеве върху големи повърхностни площи с уникална форма.

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

Темата се изпълнява от учени от Лъбораториите „Високотемпературни оксидни системи“, „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“ и „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Посредством XPS са изследвани смесени оксиди CoCr₂O₄, NiAl₂O₄/каолин и CdFe₂O₄ и е установен техният химичен състав и степента на окисление. Намерено е, че Малахитово зелено (MG) багрило се разгражда ефективно в присъствие на CdFe₂O₄. Фотокаталитичната активност на хетерогенната структура NiAl₂O₄/каолин (шпинел-каолин) за разграждане на MG багрилото е висока при слънчева светлина и с добавяне на H₂O₂. Фотокаталитичното разграждане на Congo Red багрило от CoCr₂O₄ наночастици протича на повърхността на CoCr₂O₄ шпинел.

➤ Съвместно с учени от институти на БАН са получени нови PLA/PVP/Hydrozincite фибри и филми, притежаващи антибактериална и фотокаталитична активност. Хидроцинкитът е получен чрез зелен синтез. Филмите притежават по-висока фотокаталитична ефективност за обезцветяване на багрилото Малахитово зелено (85%), отколкото тази на фибрите (62%). Филмите демонстрират и по-добра антибактериална

активност спрямо бактерията *E. coli K-12*. Получените материали са обещаващи кандидати за приложения за опаковки на храни и пречистване на вода.

- Получени са проби с никелов ферит NiFe_2O_4 /активен въглен и $\text{Ni}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{AC}$, чрез съвместно утаяване, последвано от термична обработка в инертна атмосфера с цел обезцветяване на багрилата бромокрезол лилаво (BCP), бромотимол синьо (BTV) и тяхната смес под UV-A светлина. Фотокатализаторът със състав $\text{Ni}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4\text{-AC}$, $x = 1$ демонстрира най-висока фотокаталитична активност към обезцветяване на BTV в сравнение с другите тествани материали $\text{Ni}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{AC}$, $x = 0.25; 0.5$. Това изследване доказва, че получените материали с активиран въглен с никелов ферит са подходящи като фотокатализатори за обезцветяване на BTV багрилото и демонстрират относително висока адсорбционна способност към BCP багрилото.

- Чрез зол-гел метод са синтезирани прахове в дву- и трикомпонентни системи съдържащи TiO_2 , TeO_2 и V_2O_5 . Изследвани са техните фотокаталитични и антибактериални свойства. Доказано е, че едновременното присъствие на TiO_2 , TeO_2 и V_2O_5 подобрява антибактериалните свойства на образците срещу *E. coli K12*, в сравнение с фотокаталитичните свойства на същите състави. Структурното им характеризирание показва, че трикомпонентните състави се отличават с по-добра свързаност между структурните единици.

- Предложен е нов подход за получаване на двуслойни влакна (йерархични структури) чрез комбиниране на електропредене и отлагане на атомен слой (ALD). Влакната от поливинил алкохол (PVA) се получават чрез електроспининг и впоследствие се покриват с тънък слой Al_2O_3 , отложен при ниска температура чрез ALD. Тази процедура позволява да се получат ZnO филми с по-добра кристалност и стехиометрия.

- Проследено е въздействието на космическата радиация върху слоеве от стъкловъглерод след продължителен престой върху МКС. Единствените наблюдавани значими промени са резултат от замърсявания върху повърхността. За характеризирание на образците бяха използвани XRD, SEM и течна сцинтилационна спектрометрия.

Сорбенти за пречистване на течности

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Материали и процеси за опазване на околната среда“, «Кристалохимия на композитни материали» и „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“.

- Изследвана е ефективността за отстраняване на катионното багрило - метиленово синьо на три материала на основата на графен. Графеновите материали - графенов оксид, редуциран графенов оксид и нов 3D-редуциран монолит от графенов оксид са получени чрез модифицирания метод на Тур, съответно редукция с аскорбинова киселина и хидротермална редукция в присъствието на амоняк. Изучено е влиянието на основните фактори на процеса на адсорбция (време на контакт, начални концентрации на багрилото, рН на разтвора и температура) върху способността на тези материали да адсорбират метиленово синьо (MB). Изотермата на Лангмюир и кинетичният модел на реакция от псевдо-втори порядък описват най-добре

равновесните експериментални данни за изследваните материали. Изчислени са стойностите на термодинамичните параметри, които показват спонтанния и ендотермичен характер на процеса. Установено е, че най-висок адсорбционен капацитет проявява 3D-редуцирания монолит от графенов оксид. Комбинацията от неговата порьозна структура и повърхностна функционализация с азотни групи прави 3D-редуцирания монолит от графенов оксид високоефективен адсорбент за МВ. Въпреки това, резултатите показват, че и трите изследвани материала са подходящи адсорбенти за отстраняване на катионни багрила.

➤ Синтезът на целулозния биосорбент се състои от два основни етапа: отстраняване на хемицелулоза и лигнин от сурови оризови люспи и избелване. За охарактеризирането му се използват инструментални методи като XRD, DTA, FTIR, SEM, както и нискотемпературна адсорбция на азот. Установено е, че адсорбционното равновесие се постига през първите пет минути, което предполага отличен афинитет на изследвания материал към Ag(I) йони. Експерименталните данни се описват математически най-добре с моделното уравнение на Фройндлих, което предполага, че има взаимодействие между адсорбираните сребърни йони и съществуват различни адсорбционни центрове на повърхността на биосорбента, т.е. повърхността му е хетерогенна. Резултатите показват висок адсорбционен капацитет на изследвания материал, което го прави обещаващ адсорбент за сребърни йони.

➤ Проведени са предварителни експерименти за определяне на адсорбционните свойства на утайка от кафе по отношение на Zn(II) , Cu(II) и Cd(II) йони с оглед използването ѝ за пречистване на води. Утайката е предварително промита, изсушена и смляна до размер на частиците под $300\ \mu\text{m}$. Изследванията на адсорбционната способност на утайката от кафе се провеждат спрямо едноелементни и мултикомпонентни водни разтвори, като концентрациите на металните йони в изходните разтвори и в тези след адсорбцията се определят с метода TXRF. Изследвано е влиянието на рН на изходния разтвор и на времето на контакт върху количеството на адсорбираните йони. Установено е, че равновесието се постига при 10-тата минута за Cu(II) и Cd(II) и при 2-та минута за Zn(II) . Забелязва се значително намаляване на количеството адсорбирани йони в мултикомпонентен разтвор спрямо еднокомпонентни разтвори.

Адсорбенти за CO_2 и за съхранение и пречистване на съвременни горива

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията "Реактивност на твърди повърхности".

➤ Изучени са търговски образци от CeO_2 , както и CeO_2 и $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$, получени чрез утаяване от Ce^{3+} прекурсор, с цел да се изясни влиянието на структурните и текстурни характеристики върху адсорбцията на CO_2 . Посредством ИЧ спектроскопия и Термо програмирана десорбция на CO_2 са установени видът и термичната стабилност на хемосорбционните форми на CO_2 . Адсорбцията на вода върху CeO_2 е до голяма степен дисоциативна и благоприятства формирането на нестабилни хидрогенкарбонати. Лабораторно получените образци имат сходна повърхност, която е по-висока от търговските. Въпреки това, поради специфичната си пореста структура, лабораторно полученият CeO_2 показва ниска ефективност при динамична адсорбция.

Най-висок динамичен капацитет и най-ниска чувствителност спрямо влага демонстрира смесеният $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ оксид, което се свързва съответно с дефектната му повърхност и недисоциативната адсорбция на вода.

➤ Адсорбцията на CO_2 върху CaY зеолит е изучена с ИЧ спектроскопия, а адсорбционните комплекси са моделирани с DFT. Установено е, че Ca^{2+} центрите в зеолита могат да адсорбират две молекули CO_2 при стайна температура и относително ниско парциално налягане, като имат резервен потенциал да свържат трета молекула при повишаване на равновесното налягане. За разлика от тях Na^+ центрите в зеолит Y при стайна температура могат да свържат само по една молекула CO_2 , като енталпията на адсорбция е ниска, поради което количеството на адсорбиран CO_2 е малко при относително ниски парциални налягания. Резултатите обясняват високия адсорбционен капацитет на CaY при стайна температура.

➤ Изучен е ефектът на водата върху адсорбцията на CO_2 върху CaY . Установено е образуването на смесенолигандни комплекси $\text{Ca}^{2+}(\text{H}_2\text{O})(\text{CO}_2)$, $\text{Ca}^{2+}(\text{H}_2\text{O})(\text{CO}_2)_2$ и $\text{Ca}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{CO}_2)$ в зависимост от температурата и парциалното налягане на CO_2 и водните пари. Резултатите показват, че отрицателният ефект на водата върху адсорбцията на CO_2 се смекчава от възможността за образуване на смесено-лигандни комплекси.

Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции

Темата се изпълнява от учени от Лаботорията "Реактивност на твърди повърхности".

➤ Изучена е координационната химия на Ca^{2+} в CaX зеолит с помощта на ИЧ спектроскопия на молекули-сонди (CO и N_2), адсорбирани при ниска температура. Установено е, че при адсорбция на CO , Ca^{2+} йоните образуват моно-, ди- и трикарбонили. Подобни резултати са получени и при адсорбция на N_2 , което предполага, че достъпните Ca^{2+} центрове, заемащи S_{II} позиции в CaX , притежават по три координационни ваканции. Въпреки че имат подобна координационна химия, Ca^{2+} йоните в зеолитите X и Y показват някои различия. Центровете Ca^{2+} в зеолит X са с по-слаба киселинност и ефектът на втората адсорбирана CO_2 молекула е по-силно изразен.

➤ Синтезирани са металорганични структури (MOF), изградени от циркониевооксидни клъстери и бензендикарбоксилатни линкери (UiO-66), по солвотермален метод със и без използване на бензоена киселина като модулатор. След вакуумиране при стайна температура се наблюдават мостови $\mu_3\text{-OH}$ групи, които изчезват при 250°C . В MOF материала, синтезиран без модулатор, се наблюдават координационно ненаситени Zr^{4+} центрове, докато в синтезия с модулатор материал тези центрове са наситени с бензоати, което предотвратява тяхното взаимодействие с молекулите-сонди. Дехидроксилирането води до получаването на друг вид Zr места, които не взаимодействат с CO , но образуват комплекси с ацетонитрил, вероятно поради преструктуриране. Резултатите показват, че ИЧ спектроскопията е мощен инструмент за изследване на киселинни центрове в MOF материали, което е особено важно за приложението им в адсорбцията и катализа.

Функционални материали и наноструктури за детектиране на вредни газови емисии в околната среда

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“

➤ Съвместно с колеги от ИЕ-БАН са получени и изследвани бинарни метални оксиди от ZnO-NiO и ZnO-TiO₂. Изследваните системи са синтезирани чрез импулсно лазерно отлагане във въздух при атмосферно налягане. Определена е морфологията и химичният състав, структурата и оптичните свойства на различните системи. Установено е, че в случая на ZnO-NiO се получават порести наноструктури, състоящи се от наночастици от ZnO и NiO, докато пробите ZnO-TiO₂ се състоят от смес от наночастици от ZnO и Zn₂TiO₄. Демонстрирано е едно възможно приложение на такива композитни структури, като сензорни елементи за CO газ. Резултатите показват, че системата ZnO:Zn₂TiO₄ регистрира концентрация от 250 ppb CO при стайна температура.

Тема В: Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг

Оценяване и подобряване на екологичното състояние на замърсени природни води и почви

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“ и „Кристалохимия на композитни материали“

Част от работата по темата през тази година се финансира от НПП „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“. Работен пакет 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)“ и е описана в т. 1.5.2 от настоящия отчет. В допълнение към тях са извършени следните дейности:

➤ Определена е йонообменната (в 1 M KCl) и водоразтворима (в дестилирана вода) мобилност на Al, Fe, Mn, Co, Ni, Cu, Zn и Pb в почвени разтвори от 7 почви от района на ТЕЦ Бобов дол. Установено е, че в тези почви Al и Fe се извличат незначително и с двата екстрагента. Най-високи мобилни индекси са изчислени за Pb. Водноразтворимите Mn²⁺ йони са значително повече спрямо обменните във всички екстракти. Ni се екстрахира в различна степен в зависимост от вида му в почвата и от мобилизиращия агент. Co, Cu и Zn са под границата на определяне при използвания метод. Термодинамично са моделирани формите на елементите във водно-почвените екстракти. Определени са доминиращите химични форми. Изследвана е акумулацията на елементите в листа и стъбла на прилежаща тревиста растителност. Доказано е натрупването на Cu и Pb, които присъстват в моделния почвен разтвор като металоорганични комплекси. Mn, чиито доминиращи форми са свободните йони, не е установено да се натрупва въпреки относително високата си мобилност. Тези данни показват, че органометалните форми са предпочитани пред неорганичните форми за акумулиране от растенията.

➤ Термодинамично са изчислени формите на преходните метали във води на езерото Маратон, Гърция (пробовземане 2023) и са обобщени с резултатите, получени от 2022 г. От всички анализирани лиганди (OH⁻, Cl⁻, SO₄²⁻, CO₃²⁻, NO₂⁻, NO₃⁻, PO₄³⁻, F⁻, HAsO₄²⁻, H₂AsO₄⁻, CrO₄²⁻, HCrO₄⁻, HVO₄²⁻, HVO₃²⁻, H₂VO₄⁻ и фулво киселини), концентрациите на OH⁻, SO₄²⁻, CO₃²⁻, Cl⁻ и фулво киселините са най-високи и при трите пробовземания, като във всички случаи превишават между 200-8000 пъти

концентрациите на анализирани метали. Ето защо разпределението на химичните форми при трите пробовзимания е аналогично и се определя от способността на металите да се координират предимно с някои от тези лиганди и да образуват стабилни комплекси. Al преференциално образува хидрокси комплекси и формите $Al(OH)_n^{3-n}$ и $OrgAlOH$ са доминиращи, като съотношението им зависи от рН и разтворения органичен въглерод. Fe, Cu и Pb показват най-голям афинитет към органичните лиганди и органометалните комплекси са доминиращи сред тях. Mn съществува главно като свободни йони и неорганични комплекси. Ni, Co, Zn и Cd показват еднаква склонност към образуване, както на неорганични, така на органични комплекси. Rb, аналогично на K и Na, съществува главно като свободен йон. Sr и Ba са химически близки до Ca и Mg и също съществуват главно като свободни йони, но в по-малки количества от Na, K или Rb. При тях, са изчислени 5 – 7% сулфатни, 0,5 – 1% карбонатни и 0,2 – 0,8% органични форми. Tl също съществува главно като свободен йон.

➤ Установена е връзка между химичната форма на елемента и адсорбцията при третиране на водите с дървесна пепел. Термодинамичните изчисления показваха, че Sr, Ba, Zn, Mn и Ni присъстват като свободни йони в изходните води. Те се адсорбират преимуществено от пепелта. За разлика от тях Cu и Pb, чиито доминиращи форми са металоорганичните комплекси не променят своята концентрация след третирането. Установено, е че при контакт на дървесната пепел с водата се повишава рН и концентрацията на разтворен органичен въглерод, вероятно поради частичното разтваряне на пепелта. Това води до промяна в разпределението на формите на Zn и Ni, при които се увеличава количеството на органометалните комплекси за сметка на свободните йони. В резултат се намалява степента на извличане на Zn и Ni с течение на времето. Тези резултати показват, че за очистване на водите чрез адсорбиране на металите е необходимо да се създадат условия за доминиращо присъствие на свободните метални йони.

➤ Изследвана е педогенезата, интензитетът на изветряне и влиянието на геохимията на Fe върху наличието на Ni в серпентинови почви от Източните и Южните Родопи, които са в ранен стадий на развитие и са умерено изветрени. Почвите се характеризират с ниски до средни стойности на катионнообменен капацитет, доминирани от Mg, високо съдържание на Ni ($919.2\text{--}2397.2\text{ mg.kg}^{-1}$) и ниско до средно съдържание на възможния за екстракция Ni ($13.4\text{--}125.3\text{ mg.kg}^{-1}$). До 10% от общия Ni може да бъде достъпен за растенията, като наличността на Ni се контролира главно от аморфни/слабо кристализирани Fe-оксиди.

Получаване, съхранение и оползотворяване на български природни ресурси (по-специално минералните ресурси на Черно море) за нуждите на козметиката и фармацевтиката

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“

➤ Продължава разработването на технологии за получаване на нови продукти на основата на черноморска луга и кал. През 2023 г. е разработен и нотифициран 1 нов козметичен продукт по поръчка на бизнеса.

Фитоизвличане на полезни компоненти от обекти на околната среда – почви, води и др.

Темата се изпълнява от учени от Лаборатория „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“.

➤ Проведени са експерименти, свързани с разработването на нови варианти на процедурата за извличане на рений от цементационен меден концентрат. Целта е да се избегне предварителното нагряване на концентрата и да се съкрати времето му на престой във водния разтвор. За да се постигне пълното окисление на рения до разтворимата му перренатна форма е използван водороден пероксид като окислител, а също и въздух, който се барбутира през разтворите. Резултатите от опитите са обнадеждаващи. Изследванията в тази посока ще продължат.

Тема Г: Нови подходи за инструментален и теоретичен анализ на материали

Спектроскопски методи за анализ на локалната структура на твърдотелни материали: електронен парамагнитен резонанс, ядрено-магнитен резонанс, вибрационна спектроскопия, електронна спектроскопия във видимата област; електронна спектроскопия на твърди повърхности;

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“.

➤ Чрез XPS метода е изследвано влиянието на химическата обработка върху структурата и морфологията на въглеродните фази, химичните взаимодействия на два вида графит и два вида сажди с ацетон, толуен и фенол. Най-голяма промяна на фазовия състав (главно съотношението на sp^2/sp^3 хибридизиран въглерод) и на химичния състав (главно съдържанието на кислород) (повече от два пъти) е установена в ENSACO 350 G третиран с толуен и фенол, както и в SPHERON 5000 третиран с ацетон. Последният резултат може да се обясни с прекъсване на връзките между графенови листове от периметъра на сферичните частици, които най-често се наблюдават при обработения с ацетон SPHERON 5000 проби.

➤ С XPS са изследвани въглеродни филми отложени с помощта на CVD процеси, базирани на термично разлагане на ацетон, извършено при високи температури от около 1150 °C в основен поток от Ar при различни концентрации на въглерод-съдържащия прекурсор и относително дълго време на отлагане (в диапазона от 45 до 90 минути). Установено е, че процесът на отлагане на слоя се свързва първоначално с образуването на SiC чрез директна карбонизация на повърхността на Si субстрата. За по-дълги процеси на отлагане (повече от 45 мин.) и присъствие на естествен оксид на повърхността на Si преди началото на CVD процеса, повърхността на пробите е покрита с филми, обогатени със SiO₂ и C–O–C комплекси, докато останалата част от повърхността на пробата е покрита с филм, структурно подобен на aC. Такива филми вероятно са резултат от миграцията на комплексите SiO₂ и Si–O–C в SiC/въглеродните филми към и от изолираните области, заети от SiO₂. Изследванията са в изпълнение на проект КП-06-Н58/2 към ФНИ.

➤ Изследвано е чрез XPS влиянието на включения от калций върху стабилността на фосфатни покрития, целящи корозионната защита на алуминиева сплав (Al1050). Покритията са получени в ИФХ – БАН. Установено е, че калцият се намира на повърхността под формата на Ca₅(PO₄)₃(OH). Резултатите разкриват, че калцият оказва

съществена роля върху стабилността на фосфатните покрития, от там и за цялостната корозионна защита на алуминиевата сплав.

➤ Чрез XPS е изследван ефектът на термичното третиране върху корозионната резистентност на алуминиева сплав, покрити с цериеви конверсионни покрития. Образците са получени в ХТМУ. Установено е, че в резултат на термичното третиране, поради формирането на стабилни цериеви(IV) съединения, значително се е повишила корозионната резистентност на алуминиевата сплав.

➤ Заедно с колеги от ИЕ-БАН са изследвани и сравнени фазовият състав, микроструктурата, морфологията и физикохимичното състояние на повърхностите на наноструктури от метали (Au и Pt) и метални оксиди (ZnO и TiO₂), отложени чрез пикосекундна лазерна аблация във вакуум и във въздух при атмосферно налягане. Пикосекундната лазерна аблация, извършена във вакуум, води до получаването на тънки филми с вградени наночастици с различен размер. Изпълнението на същия процес във въздух при атмосферно налягане формира порести наноструктури, съставени от наночастици.

➤ В рамките на проект с колеги от ИФХ-БАН са получени нови двуслойни системи върху стомана, които се състоят от модифицирани цинковани покрития Zn-Co (3 тегл.%) или Zn-Ni (10 тегл.%) като подслой и зол-гел TiO₂ филм като топ слой. И двете системи имат хидрофобна повърхност-контактните ъгли на омокряне са над 90°. Устойчивостта на корозия и защитната способност са оценени чрез потенциодинамични поляризационни (PDP) криви, както и измервания на поляризационно съпротивление (Rp) за продължителен тестов период (35 дни) в среда от 5% разтвор на NaCl. XPS резултатите показват, че след обработване на покритията в корозионна среда, пиковите, съответстващи на ZnO доминират, докато в необработени слоеве пикът, свързан с TiO₂, е по-интензивен. Титанът е в окислително състояние 3⁺ и 4⁺, а цинкът - 2⁺. ZnO или Zn(OH)₂ е част от съединението цинков хидроксид хлорид (Zn₅(OH)₈Cl₂.H₂O, (ZHC)), който се появява като основен компонент на корозивно третирания цинк. Експерименталните данни доказват положителното влияние на новоразработените системи върху защитните свойства на нисковъглеродна стомана. Zn-Co/TiO₂ демонстрира по-висока устойчивост на корозия в сравнение със системата Zn-Ni/TiO₂. Това се дължи на няколко фактора: подходяща морфология на повърхността (по-равномерна, без дупки, ями или пукнатини), по-висока степен на аморфност на горния слой, както и поява на новообразуваното интерметално съединение (CoZn₁₃).

➤ Заедно с колеги от ИЕ, ИК и ИФХ са получени и изследвани ориентирани нанопроводници, съставени от смесени метални оксиди. Чрез импулсно лазерно отлагане в магнитно поле са синтезирани серия образци от Fe₂O₃-ZnO. Определена е структурата, микроструктурата, морфологията и състава на получените образци с оглед изучаване влиянието на режима на лазерна аблация и параметрите на отлагане (условия на вакуум или атмосферно налягане, наносекундна и пикосекундна лазерна аблация, различно съотношение на железен оксид и цинков оксид в използваните мишени). Резултатите показват, че се формират верижки (с дължина от десетки микрометри,

ориентирани успоредно на линиите на магнитното поле, които са изградени от наночастици.

➤ Чрез ЕПР спектроскопия е изследван механизма на екстракция на редкоземни метали чрез оксимни молекули. Изследването е съвместно с колеги от ХТМУ.

➤ Координационните свойства на цериеви йони с монензим и салиномицин са изследвани с ЕПР спектроскопия. Резултатите от изследванията се използват за обяснение на антибактериалните свойства на комплексите. Изследванията се провеждат съвместно с учени от ФХФ-СУ.

Моделиране на структури, спектроскопски свойства, адсорбционни процеси и реакционни механизми

Темата се изпълнява от учени в Лаборатории „Теоретична и изчислителна химия“ и „Интерметалиди и интеркалационни материали“

➤ С помощта на DFT/TD-DFT изчисления е изследвана серия от бис-алкинил-диимин моноядрени Pt(II) комплекси с алкинилфосфониев и ди-третбутил-2,2'-бипиридин (dtbpy) лиганди. Теоретично е изследвано фотофизичното поведение на алкинилфосфониевите лиганди с различни π -конюгирани линкери и на различни димери със или без Pt-Pt взаимодействия. В резултат на изчисленията са построени енергетични диаграми на съответните комплекси, показващи механизма на пренос и деактивацията на енергията. Предсказана е природата на активните синглетни и триплетни състояния чрез NTO подхода. Поглъщането на светлината се характеризира с електронен преход, който е от тип лиганд-лиганд пренос на заряд (LLCT), а емисията притежава смесен тип лиганд и метал-лиганд пренос на заряд (LC + MLCT).

➤ С помощта на DFT метода са изследвани тавтомерите на фавипиравир. Симулирани са абсорбционните спектри, оптимизирани са структурите на различни изомери на тавтомерните форми на фавипиравир и на неговите кълстери с водни молекули. Изчисленията показват, че енолният тавтомер е значително по-стабилен в неутралната форма на фавипиравир. Теоретично (M06-2X/def2-TZVPPD) са предсказани най-подходящите места за комплексообразуване на фавипиравир с Li^+ , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} и Ca^{2+} в ацетонитрил. Установено е, че стабилизирането на кето тавтомера се дължи на структурно пренареждане – преместване на протона от кислород към азот и улавяне на металния йон от карбонилните групи.

➤ С метода на функционала на електронната плътност (DFT и TDDFT) и в среда на разтворител вода са изследвани халкогенидни (сулфидни и селенидни) кълстери на желязо, кобалт, никел, мед, цинк, като потенциални фотокатализатори в реакцията на разлагане на вода до молекулен водород и кислород. Най-стабилните форми за селенидите са тетракарбонилните комплекси. Проследена е реакционната координата за двете полу-реакции: отделяне на водород (катоден процес) и на кислород (аноден процес) и са определени активизиращите енергии и скорост-определящия етап. Формирането на водородната молекула е скорост-определящия стадий. Комплексите с хидридни лиганди, както и изходните тетракарбонилни комплекси, притежават интензивни абсорбционни ивици във видимата област на спектъра, които са от тип пренос на заряд метал-лиганд. В енергетичен еквивалент, възможните електронни

възбуждания са достатъчни да компенсират активиращата енергия на процеса. Установено е че по-висока активност имат сулфидните и селенидни комплекси на кобалт и желязо, в сравнение с тези на никел и мед. Цинковите комплекси са нестабилни и не проявяват каталитична активност. При халкогенидните комплекси на мед и никел активиращите енергии са значително по-високи, но с вариране на броя и вида на координиращите лиганди и възможната фотоактивация при по-нататъшни изследвания може да се постигне енергетично по-благоприятен процес.

➤ Моделирани са серия комплекси на Cu(II) и Zn(II) с кумарин оксиацетатни лиганди във воден разтвор и във вакуум с използване на метода на теория на функционала на плътността. Предсказан е координационният полиедър около металния йон, начинът на координиране на лигандите, където потенциални донори са три кислородни атоми и е оценена промяната на координационното поведение на лигандите в разтвор и твърдо състояние. Симулираните ИЧ и UV-Vis спектри сравнени с експерименталните и тяхната интерпретация са използвани за потвържение на геометричната структура на комплексите. Анализът на моделните структури в разтвор е важен за обясняване на неочакваната липса на антимикробна активност на изследваните кумарини, за разлика от други медни и цинкови комплекси с кумарини.

➤ С моделни изчисления (DFT/PBEh-3c/TZVP) е изследвано катион- π взаимодействието на алкални метални катиона (Li^+ , Na^+ , K^+) с моделен въглеродород (19CC, ароматни пръстена) във водна среда. Показано е, че радиусът на металния катион заедно с микрохидратираната среда са ключовите фактори за типа взаимодействие на (микро)хидратираните алкални катиони с повърхността на 19CC. Установено е, че балансът между силата на взаимодействията $\text{M}^+-\pi(19\text{CC})$, $\text{M}^+-(\text{H}_2\text{O})_n$ при комплексообразуването и водородното свързване на водата към π -системата управляват механизма на образуване на $\text{M}^+-\pi(\text{CC})$ комплексите. Микрохидратираните Li^+ и Na^+ комплекси, свързани с π -системата на CC чрез координираните водни молекули са по-стабилни в сравнение с тези при директен $\text{M}^+ - \text{CC}$ контакт, и следователно, Li^+ и Na^+ предпочитат катион-вода пред катион- π взаимодействия. Докато, хидратираните K^+ комплекси се стабилизират при директно $\text{K}^+ - \text{CC}$ взаимодействие.

➤ През годината бе въведена нова тематика в Института, основаваща се на приложение на машинно обучение за изследване на електродни материали за презаредими йонни батерии. Приложени са различни статистически методи за скрининг на бъдещи органични електродни материали за батерии, за да се избере най-надеждната стратегия за проектиране с помощта на машинно обучение на органични редокс материали. Като обект на изследване са подбрани производни на хинона молекули. Установено е, че множествената линейна регресия с регуляризация на Тикхонов (Ridge regression) по-добре описва връзката между структура и редокс-потенциал на изследваните съединения, отколкото регресионните дървета на решенията и регресионните методи, разчитащи на комбинация от няколко дървета на решенията (ансамблови методи).

➤ Разработен е софтуер за обработка на данни от електрохимични експерименти – циклична волтаметрия и галваностатика.

- Разработен и валидиран е алгоритъм за предсказване на продукти от реакции на деградация при метал-йонни батерии, базиран на теория на графите.

Инструментални методи за анализ на археологични артефакти;

Темата се изпълнява от учени в Лаборатория „Кристалохимия на композитни материали“

- Чрез комбиниране на дифракционни и спектроскопски методи са изучени художествените материали и процесите на деградация във външните (екзонартекс) стенописи на главната църква „Рождество Богородично“ в Рилския манастир, България, за които се смята, че са последният мащабен пример на източноправославната стенопис. За първи път са описани минералните пигменти, използвани за създаване на уникална и цветна полихромна декорация на външната галерия и техните продукти на разграждане, причинени от атмосферно влияние.

Елементен анализ на проби с разнообразен матричен състав с помощта на “зелени” аналитични методи.

Темата се изпълнява от учени в Лаборатория „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“

- Оптимизирани са условията за работа с рентгенофлуоресцентния спектрометър с пълно вътрешно отражение S2 PICOFOX 400. За целта са анализирани мултикомпонентни стандартни разтвори като са варирани разрежданията на изходните разтвори, обема на пробите (5-10 µl), концентрацията на използвания като вътрешен стандарт Ga, вида на носителите (кварцови и акрилни), както и времето на експозиция на пробите (100-500 s). Установена е много добра точност и възпроизводимост на резултатите от измерванията на 3d преходните метали в разтвори с концентрации в ppm диапазона при използване на вътрешен стандарт в средния диапазон на концентрация на елементите в пробата, аликвота от 5 µl и време на експозиция от 100 s. Много удобни за работа са еднократните за употреба акрилни дискове. Тестването на чистотата на носителите на проби показва, че най-честите замърсители са битовите елементи Zn, Fe и Ca.

- Извършен е качествен и количествен рентгенофлуоресцентен анализ с пълно вътрешно отражение (TXRF анализ) на разнообразни твърди и течни проби - лабораторно синтезирани и продукти от производствени процеси. Твърдите проби са разлагани предварително и привеждани в разтвор, който е анализиран след съответно разреждане:

- Оптимизирани са параметрите на TXRF анализа за проби от синтетичен моделен разтвор със състав и концентрации, близки до този на течни включения в минерали след контакта на разтвора с минерала галенит. Установено е добро съвпадение на експериментално получените и теоретично изчислените стойности на концентрациите на елементите K, Ca, Mn, Fe и Cu. Тъй като Zn е битов елемент, наблюдава се силно завишение на получените резултати в някои от анализираниите проби. За елементите Rb, Ba и Pb относителното стандартно отклонение $RSD > 10\%$.

- Във връзка с изследване на адсорбционните способности на утайки от кафе, дървени стърготини (отпадък от мебелната промишленост) и полимерни материали, с метода TXRF е определено съдържанието на Cu, Zn, Cd и Cr във водни разтвори, след сорбцията им върху изброените материали при вариране на различни параметри -

pH на разтвора, време на контакт със сорбента и различна концентрация на анализирания метал в изходния разтвор.

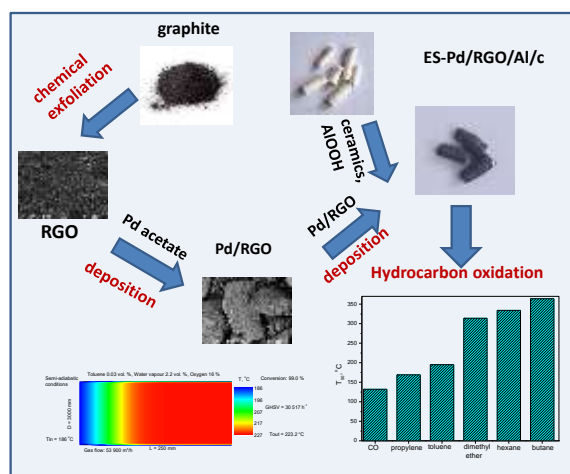
- Анализирани са ратвори на карбонатни и формиатни соли на Mn, Ni и Fe, както и на $\text{NaFeV}(\text{PO}_4)(\text{SO}_4)_2$ и композити с въглерод и графен за съдържание на Fe, V, P и S. Статистическата обработка на резултатите показва добра точност и възпроизводимост при определяне на Mn, Ni, Fe и V и занижени резултати за P и S спрямо теоретично изчислените.

- Определен е качественият и количественият състав на проби от солнокисели отпадни води от производствени процеси, дренажни води и утайки от хвостохранилището на рудник Асарел.

➤ Резултатите от изследванията върху микроводораслото *Spirulina* и върху вина от няколко сорта грозде, отглеждано в Тракийската низина са анализирани и обобщени в две публикации.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

Комплексен катализатор с иновативен дизайн и висока активност за пълно окисляване на летливи органични съединения при ниски температури



Летливите органични съединения са сред основните замърсители на въздуха и един от начините за намаляване на тяхната концентрация е използването на високоефективни, нискотемпературни и селективни катализатори. Създаден е комплексен катализатор с висока активност и дългосрочна стабилност за окисляване на толуен, пропен, пропан, бутан, хексан, диметил етер и CO при температури 100–350°C. Катализаторът е с иновативен дизайн тип „яйчена черупка“, при който активната фаза, представляваща композит от редуциран графенов оксид и Pd-наночастици, е нанесена върху керамичен носител посредством алуминиев хидрогел. Максимална каталитична активност е постигната при съотношение Pd/PdO = 1. Установено е, че в хода на реакцията част от PdO се редуцира, но поради специфичната морфология на повърхността на катализатора, протичат процеси, които водят до реокисляване на металния паладий до наноразмерен PdO. Счита се, че специфичната слоеста структура на редуцирания графенов оксид подпомага поддържането на оптималното съотношение и равномерното разпределение на двете паладиеви фази в повърхностния слой на катализатора. Съществено предимство на новия комплексен катализатор е устойчивостта му по отношение на присъствие на водни пари и серен диоксид в газовата смес, възможността за пълната му регенерация и високата скорост на реакцията. Кинетичните изследвания показват, че реакцията на окисляване на толуен протича по механизма на Langmuir-Hinshelwood, между реагенти, адсорбирани върху различни видове активни центрове. Създаден е двуизмерен модел на каталитичен реактор за прогнозиране на условията за 99.0 % превръщане на толуен при очистване на съдържащи го отпадъчни газове и температура на входа под 190°C при полуадиабатни условия.

Ръководител проф. д-р Иванка Спасова

Статия: **Highly Efficient RGO-Supported Pd Catalyst for Low Temperature Hydrocarbon Oxidation**, Ralitsa Velinova, Anton Naydenov, Diana Kichukova, Ventsislav Tumbalev, Genoveva Atanasova, Daniela Kovacheva and Ivanka Spassova, *Catalysts* 2023, 13(8), 1224; <https://doi.org/10.3390/catal13081224> (IF=3.9 за 2022)

(Article in the Special Issue Catalytic Combustion - From Laboratory Tests to Practical Applications)

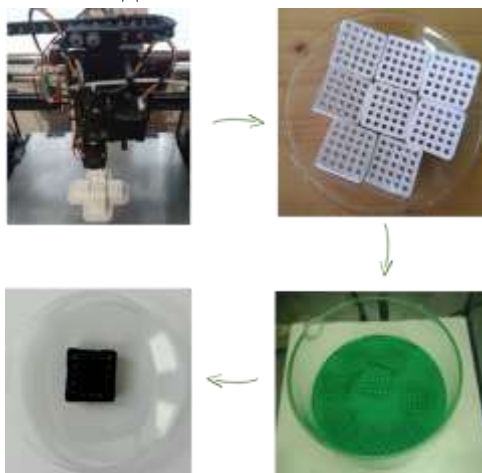
Статията е с отворен достъп на следния адрес: <https://www.mdpi.com/2073-4344/13/8/1224>

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

Състав и метод за получаване, с използване на 3D технология, на катализатор за обезвреждане на газове, съдържащи летливи органични съединения

Летливите органични съединения се явяват едни от най-честите замърсители на въздуха. Източници на тези съединения могат да бъдат индустрията, транспортът, селското стопанство, секторът на услугите и др. Една от най-обещаващите технологии за тяхното обезвреждане е каталитичното окисление. При него обикновено се използват различни видове катализатори, като нанесени благородни метали (паладий, платина), неблагородни метали и метални оксиди.

Изобретението е свързано с приложението на 3D технологията за създаването на ефективен катализатор за почистване на отпадни газове, съдържащи летливи органични съединения. В основата на разработката е получаването на активна оксидна фаза от разтвор на метални соли, нанесена върху керамичен носител, чиято форма е получена с помощта на 3D технологията. Носителят се получава чрез термично наляване на изходна суровина, съставена от оксиди на алуминий и силиций и подходящи добавки и се отличава с развита пореста структура. Катализаторът намира приложение в областта на опазването на околната среда при каталитично обезвреждане на отпадни газове, съдържащи летливи органични съединения.



Приложение на 3D - технология за получаване катализатори

Авторски колектив: доц. д-р Ралица Велинова, проф. д-р Антон Найденов, хим. Георги Иванов, гл. ас. д-р Николай Маринков и Катерина Тумбалова

Подадена заявка за патент на изобретение №:113763 от 23.08.2023 г., заявител ИОНХ.

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

Международното сътрудничество на ИОНХ намира израз при изпълнение на европейски и международни програми и двустранни проекти към ФНИ, в рамките на междуакадемични договори и споразумения (ЕБР), при лично участие на учени в международни проекти, при провеждане на научни изследвания и публикуване в сътрудничество с чуждестранни учени.

Международното сътрудничество на ИОНХ през 2023 г. се изразява в успешното изпълнение на проект TwinTeam, финансиран от МОН по ННП „Европейски научни мрежи“ с три водещи научни организации: Имперски колеж в Лондон (Великобритания), Институт за приложни материали – системи за съхранение на енергия към Технологичния институт в Карлсруе (Германия) и Институт по материалознание към центъра на Испанския съвет за научни изследвания и Университета на гр. Севиля (Испания). По-важните резултати са:

а) ИОНХ проведе Четвърти международен семинар „Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat 4)“ от 10 до 14 май 2023 г. в Поморие. Тази конференция бе заключителна за проекта TwinTeam и на нея присъстваха учени от партньорските чуждестранни организации. На форума се събраха около 110 български и чуждестранни учени, които представиха и обсъдиха съвременните тенденции в разработването на материали от ново поколение в три основни направления – А: Материали и тънки филми за защита на околната среда, В: Материали за съхранение на чиста енергия и С: Керамика/биокерамика и стъкла за по-добър живот (с приложения в оптиката, молекулната електроника и медицината). Представени бяха 16 устни доклада, 3 фирмени презентации (спонсори FOT, ELTA и Metrohm), 25 кратки презентации и над 75 постерни представяния. Създадена бе интернет страница <http://twinteam.igic.bas.bg/sizemat4/> за информация и онлайн регистрация; абстрактите са публикувани в Book of Abstracts, <http://twinteam.igic.bas.bg/wp-content/uploads/2022/01/ABSTRACT-SIZEMAT4.pdf>; мероприятиято е отразено в мас-медиите. Връчени бяха 5 награди с финансовата подкрепа на списание Materials, MDPI, за най-добро представяне на млади учени на форума.

б) Публикувана е **книжка с 22 статии, озаглавена “Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat 4)” към “Materials“, реферираното научно списание с отворен достъп, Q2, IF=3.4**), издавано от утвърденото научно издателство MDPI, която съдържа **20 публикации** на съавтори от ИОНХ по съответните тематики. Всички статии са рецензирани най-малко от двама независими международни рецензенти, следвайки практиката на издателство .

През 2023 г. в рамките на проект „Master“ към програма M-ERA.NET, е установено научно сътрудничество с Университет на град Кордоба, Испания; Университет Инону, Малатя, Турция и TÜBİTAK Институт за железопътни транспортни технологии (Тюбитак-Руте), Турция.

През 2023 г. продължи изпълнението на проект по двустранна спогодба на ФНИ с Университет по технологии, Департамент по инженерна механика в гр. Далян, КНР по тема „Електродни материали на основата на съединения на преходните метали за литиево-йонна батерия“ (ИОНХ е водеща организация).

В ИОНХ се изпълняват четири проекта в рамките на междуакадемични договори и споразумения (ЕБР): с Египетската Академия за Научни Изследвания и Технологии (ЕАНИТ) по тема „Текстилни изделия, функционализирани с метал-органични структури (MOF) притежаващи UV-защита, антимикробни и противокомарни свойства“; с Център за изследване на енергията в Будапеща, Унгария на тема „Синтез и

структура на цинково-бисмут-боратни стъкла, модифицирани с волфрам“; с ТЮБИТАК (Университет Muğla Sıtkı Koçman, Турция) на тема „Изследване на многокомпонентни АВ сплави на базата на Mg за съхранение на водород, както в газова фаза, така и електрохимично“; с Институт по химия, технология и металургия, Център по Катализ и химично инженерство Сръбската академия на науките и изкуствата на тема „Екологични антикорозионни хибридни покрития“. Учени от ИОНХ имат лично участие в проекти по ЕБР с CNR-IMM (Катания, Италия), Египет и Руския научен фонд.

През 2023 г., осем чуждестранни учени (от Турция, Испания, Франция, Словения и САЩ) са посетили ИОНХ и представили доклади пред Колоквиума на Института.

Международното сътрудничество на учените от ИОНХ на институтско ниво е и под формата на неформални контакти за съвместни изследвания с колеги от чуждестранни научни институции. В резултат на международното сътрудничество, което ИОНХ поддържа, 34 % от научните публикации са с чуждестранни учени от водещи научни организации.

Значим международен проект Програма M-ERA.NET

Контрол на електродната повърхност за постигане на свръхвисок обратим капацитет

Водеща организация: ИОНХ - БАН

Партньори: 1. Университет на град Кордоба, Испания

2. Университет Иньоню, Турция

3. TÜBİTAK RUTE, Турция

MASTER цели да се въведе изцяло нова концепция за контрол на повърхността на електродни материали, за да се постигнат обратими капацитети близки до теоретичните.

Специфичните цели на проекта са: (а) да се вникне във фундаменталните реакции, протичащи на електродните повърхности/ интерфейси; (б) да се използват ново-придобитите знания за разработването на електродни материали с подобрени свойства; (в) да се интегрират повърхностно-модифицираните електродни материали в **пълна натриево-йонна батерия**, и (г) да се мултиплицира въздействието на проекта извън натриево-йонни батерии.



Стартираща среща: 20.10.2023 г., ИОНХ-БАН

4. УЧАСТИЕ НА ИОНХ В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

ИОНХ активно изпълнява **образователната програма с качествено и конкурентоспособно обучение на докторанти** в различни форми и образователни инициативи. Институтът разполага с квалифицирани учени, необходима апаратура (максимално добра за условията в България), има опит и традиции. ИОНХ е акредитиран (до 2026/2027 г.) да подготвя докторанти по 5 докторски програми – неорганична химия, химия на твърдото тяло, химична кинетика и катализ, аналитична химия и теоретична химия. В центъра за обучение на БАН, учени от ИОНХ предлагат 7 специализирани курса (до 2026 г.). През 2023 г. са проведени 2 курса към ЦО-БАН: Спектроскопски методи за анализ на повърхността и обема на материалите (30 ч.) (проф. Р. Стоянова) и Спектроскопски методи за изследване на твърди повърхности (10 ч.) (проф. И. Аврамова). ИОНХ е организатор на III-та Национална школа по "Увод в праховата рентгенова дифракция" с около 30 участника (проф. Д. Ковачева и доц. П. Цветков).

През 2023 г., **един докторант**, самостоятелна форма на обучение, успешно защити дисертационния си труд по докторска програма „Теоретична химия“. Дисертационният труд е на тема "Теоретично изследване на специфично влияние на средата върху механизма на протонен пренос при мономерни единици на нуклеиновите киселини и биологично активни съединения".“ (Нина Стоянова-Нанкова). През 2023 г. като задочен докторант е зачислена Росица Кукева с тема на дисертацията „Приложение на ЕПР спектроскопията в изследванията на електродни материали за презаредими батерии“, докторска програма „Неорганична химия“. Двама докторанти на самостоятелна подготовка и един редовен докторант, отчислени с право на защита са в подготовка на дисертационен труд.

През 2023 г. двама докторанти в ИЕ-БАН и ИЕЕС-БАН са защитили успешно докторските си дисертации под съръководството на проф. И. Аврамова и доц. И. Стамболова от ИОНХ.

През 2023 г. в ИОНХ е изготвена магистърска теза „Ефект от високо енергийно смилане върху фазовите и термични характеристики на калциевофосфатни биоматериали, приложими в медицината“ от Йорданка Тупарова (р-л проф. Д. Рабаджиева). Тезата е успешно защитена в ХТМУ-София.

ИОНХ създава отлични условия за развитие на научния потенциал на младите учени. В подкрепа на това, от 14 докторанта, защитили дисертации в периода 2016-2023 г., 12 от тях продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работа си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института. Активната научна работа на младите учени по проекти допринася за развитието им като специалисти и за успешното им интегриране в европейското изследователско пространство. Двама млади учени от ИОНХ (Тина Дилова и София Славова) изпълняват проекти по Конкурс за финансиране на Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти към ФНИ. Млад учен от ИОНХ (Нина Стоянова-Нанкова) участва с проект в ННП „Млади учени и постдокторанти-2“ към МОН, модул Млади учени. Осем млади специалисти са привлечени за работа по проекти Вихрен.

Млад специалист от ИОНХ (Катерина Тумбалова), привлечен по време на Студенските практики, продължава работата си в ИОНХ. В резултат на успешната изследователска работа в ИОНХ, тя спечели студентска стипендия „Архимандрит Максим Райович“ на община Дряново и стипендия на Фондация „Еврика“ за постижения в овладяването на химията и химичните технологии на името на акад. Ротислав Каишев.

През 2023 г. ИОНХ се включи активно в Проект BG05M2OP001-2.013-0001 на МОН „Студентски практики – Фаза 2” финансиран от ОП НОИР, в рамките на който са проведени 6 студентски практики за студенти от ХТМУ. Организирано е еднодневно посещение в ИОНХ на студенти от ХТМУ-София.

През 2023 г., в ИОНХ са проведени ученически практики за ученици от четири училища: ЧОУ „St. George International School & Preschool“ - София, ПГЕБ „Проф. д-р Асен Златаров“ - София, ПМГ "Яне Сандански" - Гоце Делчев и средно училище „Васил Левски“ – Севлиево. В организиран курс „Получаване на неорганични материали и инструментални методи за тяхното охарактеризиране“ е обучаван (39 часа) един ученик от ЧОУ „St. George International School & Preschool.

Учени от ИОНХ са участвали в 9 изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент”. Учен е участвал в комисия по оценка и защита на постерни презентации при Национален младежки конкурс "Празник на химията 2023". ИОНХ създава благоприятна среда за кариерно развитие на утвърдили се учени и през 2023 г успешно са проведени два конкурса за академичната длъжност „професор“, три конкурса за „доцент “ и два - за „главен асистент“.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

5.1. Осъществяване на съвместна иновационна дейност с външни организации и партньори, вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина;

➤ Съвместната иновационна дейност на ИОНХ през 2023 г. с външни организации и партньори (вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина) се осъществява под формата на вътрешен институтски договор „Химия на водно-солеви системи за оползотворяване на природни минерални ресурси и отпадни продукти“, в частност морски химически ресурси. Тя включва разработка на продукти и технологии на медицинска натурална козметика, производство и продажба по поръчки от фирми на продукти под три търговски марки: **Black Sea Stars**, която е и международна, и две национални - **Sea Stars** и **Solilug**. Продължи основната работа на ССПР-Бургас по отношение разработки на иновативни продукти и технологии и организиране на малки производства на натурална медицинска козметика по поръчка на бизнеса. През годината е сключен 1 **нов договор**. Основни клиенти в страната са: "Релакс Би" ЕООД; "Биоспер" ЕООД; "Бляк сий Старс" ЕООД; "Крем Комфорт" ООД; "Агенция Бик" ЕАД; "Ню Грийнъри" ЕООД, "Беланн" ЕООД, "Бионтра" ЕООД; "Лугестика" ЕООД, "Контеса БГ" ЕООД, "Козметикс България Профешънъл" ЕООД, "Виденови КО" ООД, и в чужбина: Vengard UK Ltd – Англия, Германия. ИОНХ е член на Сдружение GS1 България и Българска Национална Асоциация Етерични масла, Парфюмерия и Козметика.

Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“-София и -Бургас има за предмет на своята дейност провеждане на НАУЧНИ и ПРИЛОЖНИ изследвания, свързани с получаване и охарактеризиране на неорганични химични вещества, с разработване на технологии за тяхното производство. Извършва се тестване и пилотни изследвания на технологии за химически продукти и реактиви, и за козметични и фармацевтични продукти, организиране на малки производства и проучване на пазара.

➤ Проведени са изследвания в различен мащаб върху нови и утвърдени в практиката катализатори за работа в системи за опазване на околната среда, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания). В лабораторни условия са реализирани експерименти при условия, максимално доближаващи тези в практиката, основно по отношение на съдържание на водни пари и серен оксид. Разработват се

модели, описващи процесите на пълно окисление на летливи органични съединения в отпадни газове.

➤ През 2023 г. е одобрен един патент за изобретение „Природен композитен материал, метод за неговото получаване и използването му за дълбоко адсорбционно десулфиране на течни горива“, заявител ИОНХ (И. Узунов), реализиран по проект на ННП „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“. Заявен е нов патент за изобретение „Състав и метод за получаване, с използване на 3D технология, на катализатор за обезвреждане на газове, съдържащи летливи органични съединения“, заявител ИОНХ (Р. Велинова, А. Найденов, Г. Иванов, Н. Маринков, К. Тумбалова). Други две изобретения със заявител ИОНХ-БАН са все още в експертиза. Действащи са 6 патента, 3 търговски марки и 3 полезни модела (от тях ИОНХ е притежател на два патента и един полезен модел).

➤ ИОНХ изпълнява договор (2021-2023) с Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас за провеждане на анализи и количествено определяне на химичен състав.

➤ ИОНХ (Лаборатория ИИМ) развива иновативна дейност, свързана с международните фирми Cabot (САЩ) и Graphit Kropfmühl GmbH (Германия). Дейността се изразява в изследвания на въглеродни материали с различна степен на въглификация като електроди за натриево-йонни батерии. Изследванията включват провеждане на цикловолтамперометрични и галваностатични тестове в моделни електрохимични клетки при стайна и повишена температура.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

6.1. ССПР-Бургас поддържа финансово (данъци, такси, застраховка, режимни, др.) съществуването на Базата на института в Бургас и се грижи за сградния ѝ фонд. В изпълнение на поръчки за фирми от страната и чужбина, през 2023 г. е реализирана продажба на обща стойност **692 327.56** лв (с ДДС).

6.2. Приходи от извършени анализи в областта на неорганичната химия- рентгенови, ИЧ, Термични анализи, ТЕМ анализи, ДТА и др. са **77 812** лв. Извършени са анализи на контрагенти от страната: Булгартрансгаз ЕАД, Сика Б-я, МарсАрмор ООД, Чайка фарма Сенсата технолоджи ООД, Техкерамик М АД, Мелексис България – ООД Калцит АД, АД,Солво Трейд ООД, МЦ Уроелит, Вал Технолоджи ЕООД, Сдружение Тракеия, Метакрозис ООД, МТГ Делфин, Агрополихим, Ронис ЕООД, Тракея ЕООД, Varite Maning ЕООД, Incolab Services, Reichle & De-Massari, РУА България ЕООД, Ге план ЕООД, Булминт Продъкшън ЕООД и Солво Трейд ООД, Smart Therm IKE (Гърция) и МЕШЙКРОЗИС ООД (България) и др.

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОНХ

Финансовият анализ (по-долу) няма претенция за изчерпателност, а само представя тенденциите във финансовото състояние на ИОНХ. Подробна счетоводна справка се подава от счетоводителите към счетоводния отдел на БАН.

През 2023 г. приходите (в лв.) на ИОНХ се формират от:

1. Бюджетна субсидия	3 232 001	
Заплати и възнаграждения (+)	2 273 696	
Издръжка	957 501	
Годишен членски внос в Сдружение GS1 България и БНАЕМПК	804	
2. Други възнаграждения	1 102 642	нещатен персонал - 10 842 по граждански договори - 45 583 обезщетения при пенсиониране - 11 730 за неизползван отпуск 9 044 за доп.тр.възнагр.по договори 1 034 487
Привлечени средства	2 562 849	
1. Разлика между получени и предоставени средства	1 683 189	
<i>Получени</i>	<i>1 760 185</i>	
ФНИ И МОН	1 434 364	
БАН-Администрация	120 218	
ИФХ-БАН	87 600	
ИЕЕС-БАН	92 300	
ИК-БАН	6 136	
възстановена сума за ЗО от лице в неплатен отпуск- 982 лв. Получени и възстановени гаранции по ЗОП	19 567	
<i>Предоставени:</i>	<i>76 996</i>	
На ФНИ възстановени остатъци по договори	23 425	
СУ-възстановен остатък по договор с ФНИ	12 140	
ИОМТ-БАН	19 000	
ИЕ-БАН	13 431	
ИМК-БАН	9 000	
2. Приходи и доходи от собственост	879 660	
приходи от продажба на продукция (с ДДС)	664 176	
приходи от извършени анализи	77 812	
договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания)	137 222	
Приходи от научни конференции	450	

и др.		
-------	--	--

През 2023 г. ИОНХ е получил бюджетна субсидия в размер на **3 232 001** лв. и има привлечени средства в размер на **2 562 849** лв. Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от **5 794 850** лв. и съотношението на собствените средства към тези на бюджетната субсидия е 44.2% към 55.8 %.

По бюджетна субсидия и финансов отчет, средната месечна брутна работна заплата за 2023 г. е **1662** лв. За сравнение, тя е по-висока от миналогодишната средна месечна заплата (**1628** лв.). Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2023 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения в размер на 1 034 487 лв. При средно допълнително заплащане от 756 лв., трудовите възнаграждения възлизат на 2418 лв. За сравнение според Националния статистически институт, средната брутна работна заплата за второто тримесечие в сектор професионални дейности и научни изследвания е 2641 лв., сектор образование – 1939 лв., за София-столица е 2697 лв. т.е. трудовите доходи на персонала в ИОНХ (бюджетни и допълнителни) за 2023 г. доближават тези на научния сектор.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2023 е 125 щатни бройки, незаети 11 бройки.

8. ИЗДАТЕЛСКА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

ИОНХ няма собствена издателска дейност. Учените от ИОНХ имат достъп до базите данни на Scopus и на ISI Web of Knowledge. ИОНХ поддържа интернет страница <http://www.igic.bas.bg/> и facebook страница <https://www.facebook.com/IGIC.BAS.BG> .

9. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ЗВЕНОТО

Научният съвет на Института по обща и неорганична химия – БАН е избран на 29.11.2023 г. (протокол № 158/29.11.2023 г. от Общото събрание на учените в ИОНХ).

**НАУЧЕН СЪВЕТ
НА ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ,
БЪЛГАРСКАТА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

№	Име, презиме, фамилия	Научна степен и научна специалност, по която е получена	Научно звание и научна специалност по която е получено	Област на компетентност	
1	Радостина Константинова Стоянова	д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Неорганична химия	ИОНХ-БАН
2	Даниела Георгиева Ковачева	д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Структура, механични и термични свойства на кондензираната материя	ИОНХ-БАН
3	Антон Илиев Найденов	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
4	Константин Иванов Хаджииванов	дхн Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ Неорганична химия Аналитична химия	ИОНХ-БАН
5	Рени Стоилова Йорданова	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
6	Михаил Йорданов Михайлов	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
7	Виолета Георгиева Колева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН

8	Ивелина Мирчева Георгиева	д-р Неорганична химия	професор Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ-БАН
9	Диана Тодорова Рабаджиева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
10	Ивалина Аврамова Аврамова	д-р Физика на кондензираната материя	Професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Катализ Корозия Изследване на повърхности	ИОНХ-БАН
11	Иванка Петрова Спасова	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
12	Кристина Костова Чакърва	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
13	Елена Здравкова Иванова	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
14	Деяна Маринова Манасиева	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
15	Геновева Борисова Атанасова	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
16	Петър Цветанов Цветков	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Кристалохимия	ИОНХ-БАН
17	Ели Георгиева Григорова	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
18	Любомир Ивов Александров	д-р Химия на твърдото тяло	доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
19	Албена Димитрова Бъчварова- Неделчева	д-р Технология на силикатите, свързващите вещества и труднотопимите	доцент Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН

		неметални материали			
20	Ралица Христова Велинова	д-р Технология на силикатите, свързващите вещества и труднотопимите неметални материали	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ Неорганична химия	ИОНХ-БАН
21	Тони Георгиев Спасов	дхн Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Химична кинетика и катализ Физикохимия Неорганична химия	ФХФ-СУ
22	Мартин Славчев Божинов	дхн Физикохимия	Професор Физикохимия	Физикохимия	ХТМУ- София
23	Силвия ЖивоваТодорова	д-р Химична кинетика и катализ	Професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ, Хетерогенен катализ	ИК-БАН
24	Петър Димитров Петров	Дхн Химия на високомолекулните съединения	Професор Полимери и полимерни материали	Полимери Фотохимия	ИП-БАН
25	Боряна Рангелова Цанева	д-р Химично съпротивление на материалите и защита от корозия (по отрасли)	доцент Електротехника, електроника и автоматика	Приложна електрохимия и корозия (анодно поведение на пасивни метали, електрохимия на корозионните процеси, локална корозия, анодиране, химично и електрохимично отлагане на метали върху проводяща и диелектрична основа,	ТУ-София

				наноструктурирани материали)	
26	Нина Бойкова Стоянова - Нанкова млад учен с право на съвещателен глас	д-р Теоретична химия	Теоретична химия	Теоретична химия	ИОНХ-БАН

10. КОПИЕ ОТ ПРАВИЛНИКА ЗА РАБОТА В ИОНХ.

Линк <http://www.igic.bas.bg/документи/> - Правилник за устройството, дейността и управлението на Института по обща и неорганична химия при Българската академия на науките (последно актуализиран с Протокол №58/29.11.2023 г.).

11. СЪКРАЩЕНИЯ ИЗПОЛЗВАНИ В ОТЧЕТА НА ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ ЗА 2023 Г.

ИОНХ	Институт по обща и неорганична химия
МОН	Министерство на образованието и науката
НСРНИ	Националната стратегията за развитие на научните изследвания
ОП-НОИР	Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“
ЮЗУ	Югозападен Университет
ФНИ	Фонд „Научни изследвания“
РП	Работна програма
ИФХ	Институт по Физикохимия
НАОА	Национална агенция за оценяване и акредитация
ИСИС	Иновационна стратегия за интелигентна специализация
ИЕЕС	Институт по електрохимия и енергийни системи
ИМК	Институт по минерология и кристалография
ИУРАС	Международен съюз за чиста и приложна химия
ИИХ	Институт по Инженерна химия
ФХФ	Факултет по химия и фармация
ФзФ	Физически факултет
ХТМУ	Химикотехнологичен и металургичен Университет
ССПР	Солеви системи и природни ресурси
ФФ-МУ	Факултет по фармация на Медицински университет
ТУ	Технически университет
СУ	Софийски университет
ПУ	Пловдивски университет
ИЕ	Институт по електроника
ГИ	Геологически институт
ИОМТ	Институт по оптически материали и технологии
ИКИТ	Институт за космически изследвания и технологии
ФДМ - МУ	Факултет по дентална медицина – Медицински университет
ИФТТ	Институт по физика на твърдото тяло
САН	Сръбска академия на науките
ЦЛ СЕНЕИ	Централната лаборатория по слънчева енергия и нови енергийни източници
ЕПР	Електронен Парамагнитен Резонанс
ТЕМ	Трансмисионна електронна микроскопия
XPS	X-ray photoelectron spectroscopy
FAAS	Flame Atomic Absorption Spectroscopy
TXRF	Total reflection X-rays fluorescence
ИИМ	Интерметалиди и интеркалационни материали
XAS	X-ray absorption spectroscopy
XRD	X-ray Powder Diffraction

Международна научна конференция SizeMat4 „Fourth Workshop on Size-Dependent Effect in Materials for Environmental Protection and Energy Application“, гр. Поморие, 10-14 май 2023 г. Научният форум е организиран от Институт по обща и неорганична химия - БАН и се провежда в рамките на проекта „Европейска научна мрежа върху материали за чисти технологии“ (TwinTeam).

